

**UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS**



Estudio de fenómenos atómicos asociados a la ablación láser

**MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR
PRESENTADA POR**

Juan Luis González-Santander

Directores

José Campos Gutiérrez

Piedad Martín Martínez.

Madrid

ISBN: 978-84-669-1582-3

© Juan Luis González-Santander, 1997



TI-1998/5

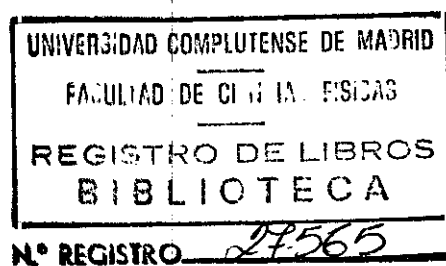
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

Dpto. Física Atómica, Molecular y Nuclear

ESTUDIO DE FENÓMENOS ATÓMICOS ASOCIADOS A LA ABLACIÓN LÁSER

Memoria que presenta
Juan Luis González-Santander
Para optar al grado de Doctor en
Ciencias Físicas

Directores:
José Campos Gutierrez
Catedrático de Física Atómica Experimental
Piedad Martín Martínez
Investigadora del CIEMAT



MADRID 1997

AGRADECIMIENTOS

Con especial atención quiero dedicar mi agradecimiento al Profesor D. José Campos Gutierrez a Dña. Piedad Martín Martínez y a Dña. Montserrat Ortiz Ramis por su constante interés y dedicación al desarrollo y buen fin de la presente memoria. Sin su inestimable ayuda y sus consejos científicos hubiera sido imposible la realización de este trabajo.

He de agradecer al Centro de Investigación del CIEMAT su ayuda por los medios y sistemas experimentales puestos a mi disposición.

También deseo expresar mi gratitud a mis compañeros del Laboratorio de Física Atómica y Láseres del CIEMAT, Ana, Antxón y Vicente, que me han dedicado tanto tiempo y esfuerzo para poder manejarme en el Laboratorio, y con los que he compartido años juntos.

Doy las gracias también a mis compañeros del Departamento de Física Atómica de la Facultad, Javier y Juan Antonio, con los que he trabajado en este último año. Ellos me han enseñado enormemente y merecen mi estima y aprecio por el trabajo que realizan.

No puedo olvidarme de mis amigos, en especial a Luis Alfonso por su ayuda en la elaboración de gráficos y diagramas. Tampoco puedo olvidarme de mis padres y de todas aquellas personas que en los momentos difíciles han mostrado su incondicional apoyo y sin los que, sin duda alguna, esta memoria no se hubiera podido llevar a cabo.

ÍNDICE

INTRODUCCIÓN GENERAL	1
-----------------------------	----------

CAP.1. DISPOSITIVO EXPERIMENTAL

A. Sistema de ultravioleta de vacío

A1.	Introducción.	4
A2.	Descripción general.	5
A3.	Láser Nd:YAG	9
A4.	Espectrómetro de 3m de incidencia normal.	13
A4.1.	Mecanismo de movimiento de la red.	16
A4.2.	Calibración en longitudes de onda.	17
A4.3.	Margen espectral.	18
A4.4.	Astigmatismo.	19
A4.5.	Resolución espectral.	20
A5.	Sistema de detección óptico multicanal.	22
A5.1.	Intensificador de imagen.	22
A5.2.	Matriz de fotodiodos.	23
A5.3.	Sistema de toma de datos.	24

B. Sistema de radiación visible

B1.	Descripción general.	28
B2.	Monocromador.	29
B3.	Analizador óptico multicanal. OMA III	30
B4.	Proceso de adquisición de datos.	35

C. Fuente de radiación

C1.	Generación y desarrollo del plasma.	37
C1.1.	Iniciación y desarrollo del plasma durante el impulso láser.	38
C1.2.	Desarrollo del plasma después del impulso laser.	40
C1.3.	Equilibrio termodinámico local.	41
C2.	Líneas espectrales en un plasma producido por láser.	43
C2.1.	Intensidad de línea.	43
C2.2.	Coeficiente de autoabsorción.	46

Referencias capítulo 1.	47
-------------------------	----

CAP. 2. APLICABILIDAD DE LA EMISIÓN DE UN PLASMA PRODUCIDO POR LÁSER A LA CALIBRACIÓN DE UN ESPECTRÓMETRO DE U.V.V.

Introducción	50
<u>A. Técnicas de calibración empleadas</u>	
A1. Razones de ramificación.	52
A2. Fuente de emisión continua.	54
<u>B. Resultados obtenidos y discusión</u>	
B1. Razones de ramificación empleadas.	56
B2. Eficiencia relativa.	61
B3. Emisión continua.	68
B4. Compatibilidad continuo-razones de ramificación.	70
Referencias capítulo 2.	72

CAP. 3. DETERMINACIÓN DE PROBABILIDADES DE TRANSICIÓN EN ÁTOMOS IONIZADOS.

<u>A. Métodos para la determinación de probabilidades de transición</u>	
A1. Método de la regla de la suma.	76
A2. Método de la vida media.	79
A3. Método de la temperatura.	82
<u>B. Aluminio VI y VII</u>	
B1. Diagramas de Grotrian.	84
B2. Espectros obtenidos.	86
B3. Autoabsorción.	91
B4. Probabilidades de transición.	98

C. Azufre II

C1. Medidas en el ultravioleta de vacío.	102
C1.2. Diagrama de Grotrian.	103
C1.3. Razones de probabilidades de transición.	104
C1.4. Resolución espacial.	105

C2. Medidas en el espectro visible.	108
C2.1. Diagrama de Grotrian.	110
C2.2. Medida de la temperatura.	111
C2.3. Medida de la densidad de electrones.	115
C2.4. Medida de las densidades de iones.	118
C2.5. Probabilidades de transición.	121
C2.6. Verificación de las condiciones experimentales.	123

Referencias capítulo 5.	125
-------------------------	-----

CONCLUSIONES	127
---------------------	------------

APÉNDICES

A. Programas realizados.	131
A1. Compat	131
A2. Ratio	144
A3. Sato	167
B. Comunicaciones en Congresos.	179
C. Publicaciones	186

INTRODUCCIÓN GENERAL

En esta memoria se presenta un estudio espectroscópico de plasmas producidos por ablación láser de materiales sólidos para la obtención de dos objetivos fundamentales:

1. La calibración en eficiencia del sistema experimental de ultravioleta de vacío, desarrollada en el capítulo segundo.
2. La determinación de probabilidades de transición en átomos ionizados, realizada en el capítulo tercero.

El primer capítulo describe los sistemas experimentales de los que se ha hecho uso. Un sistema para detectar radiación en el margen espectral del ultravioleta de vacío y otro en margen espectral del visible. Para la discriminación de las distintas especies iónicas que aparecen, el sistema experimental para el ultravioleta de vacío permite la resolución espacial del plasma, mientras que en el caso de la radiación visible se dispone de un sistema de resolución temporal. De todas formas es preciso señalar que el margen espectral del ultravioleta de vacío está menos estudiado y presenta muchas más dificultades técnicas (mantenimiento en vacío de todo el sistema, filtros, espejos, ventanas...) que el margen espectral visible.

También en el primer capítulo se ha incluido como parte del sistema experimental la fuente de radiación espectroscópica, que en nuestro caso es un plasma producido por láser. El empleo de esta fuente de radiación presenta la ventaja de ser muy manejable y versátil, teniendo al mismo tiempo una gran capacidad de producir átomos con un alto grado de ionización.

El capítulo segundo se presenta la calibración en eficiencia del sistema de ultravioleta de vacío utilizándose el método de las razones de ramificación y la emisión de una fuente de continuo, obteniéndose un buen acuerdo entre ambos resultados. En el caso de las razones de ramificación se ha realizado un amplio estudio de valores, tanto teóricos como experimentales, obtenidos en los últimos 20 años.

En el capítulo tercero se han determinado probabilidades de transición de *Al VI* y *VII* así como de *S II*. El interés en la determinación experimental de probabilidades de transición reside en que son necesarias para medir diversas propiedades atómicas como el índice de refracción, la polarizabilidad dipolar o la susceptibilidad diamagnética de un sistema. Por tanto su determinación precisa tiene una importancia relevante en muchos campos de la Física, como Física de plasmas y Astrofísica; y la tecnología, como el diseño de láseres, análisis de elementos, etc...

Tanto en el caso del aluminio como en el azufre se presenta una discusión detallada de la metodología seguida. Por ejemplo en el aluminio se discute el problema de la autoabsorción mientras que en el azufre se plantea el método para la determinación de parámetros de interés espectrocópico en el plasma como la temperatura, la densidad de electrones etc..., necesarios para determinar si nos encontramos en condiciones experimentales de delgadez óptica y equilibrio termodinámico local.

En los apéndices se incluyen los programas informáticos que se han elaborado para resolver problemas específicos de cálculo, así como las publicaciones en revistas científicas y las comunicaciones en congresos.

CAPÍTULO 1

DISPOSITIVO EXPERIMENTAL

A. SISTEMA DE ULTRAVIOLETA DE VACÍO

A1. INTRODUCCIÓN

Debido a la gran absorción del aire, los primeros estudios en el margen espectral del ultravioleta estuvieron limitados a longitudes de onda por encima de los 2000 Å.

En 1893 Viktor Schumann^{1A.1} construyó el primer espectrógrafo de vacío e hizo su primera investigación de la radiación del ultravioleta de vacío. Utilizando un prisma de fluorita como elemento dispersivo fue capaz de mostrar que el aire, y particularmente el oxígeno, era el responsable de la absorción por debajo de 2000 Å.

Theodore Lyman^{1A.2} usando un espectrógrafo de vacío equipado con una red de difracción cóncava, fue el primero en medir longitudes de onda en este margen espectral. El uso de una red cóncava de difracción como elemento dispersivo junto con la ausencia de ventanas, permite investigar por completo la región de ultravioleta de vacío hasta los 5 Å, solapándose por tanto, con la región de los rayos X. La diferencia entre estas dos regiones consiste simplemente en que la radiación ultravioleta corresponde a cambios de energía de los *electrones más externos* de un átomo o ion, mientras que la radiación X corresponde a cambios de energía de *electrones internos*.

Comparado con la región visible y ultravioleta del espectro, el trabajo en la región del ultravioleta de vacío ha progresado lentamente, debido a que presenta mayores dificultades técnicas. Aún así, en las últimas décadas el interés en este área ha aumentado rápidamente debido a la creciente actividad investigadora en la atmósfera, el espacio y la física de plasmas.

Una excelente revisión histórica en el campo de las espectroscopía del ultravioleta de vacío ha sido escrito por Tousey^{1A.3}.

A2. DESCRIPCIÓN GENERAL

El dispositivo experimental, tal como muestra la fig.1A.1, consta de un láser de Nd: YAG cuyo haz incide a través de una ventana sobre el blanco, en una cámara en la que previamente se ha hecho vacío. Esta cámara que se muestra en la figs.1A.2-3, posee dos ventanas más para observar la posición de la muestra respecto al haz y la rendija, así como un posicionador milimétrico para colocar la misma. El eje del posicionador tiene la capacidad de rotar mediante un motor para ir girando la muestra, minimizando así su perforación o cráter.

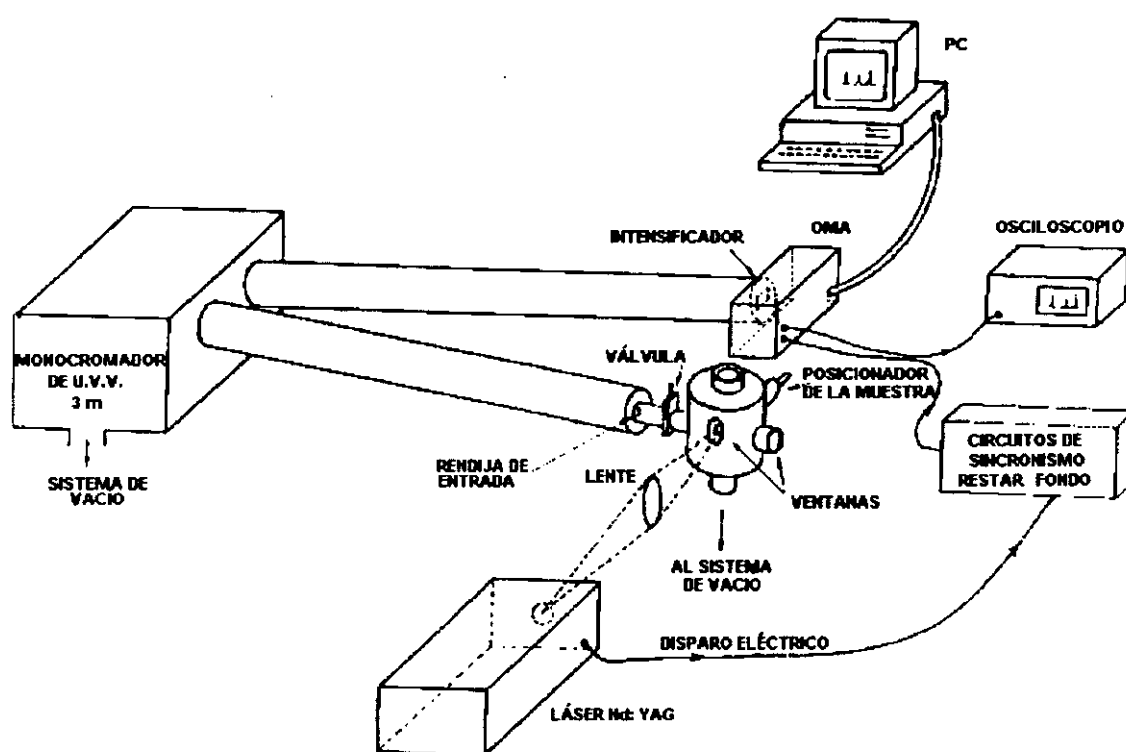


Fig.1A.1. Dispositivo experimental de ultravioleta de vacío.

Al incidir el haz láser sobre el blanco, se genera un plasma compuesto por átomos ionizados y electrones a elevada temperatura. La luz generada por el plasma pasa a través de una rendija de 100 μm de anchura, e incide sobre la red de difracción de un monocromador de incidencia normal de 3 m. Una vez difractada la luz, ésta es detectada por un analizador óptico multicanal (OMA), que envía la señal a un convertidor analógico-digital (CAD) y a su vez, a un ordenador personal PC. Este último puede mostrar el gráfico del espectro tanto

en pantalla como por impresora, así como analizar dichos espectros con programas que se han elaborado para tal fin.

Una bomba turbomolecular y una difusora mantienen el vacío en el monocromador y la cámara respectivamente. A continuación se describen todos los elementos del sistema más detalladamente.

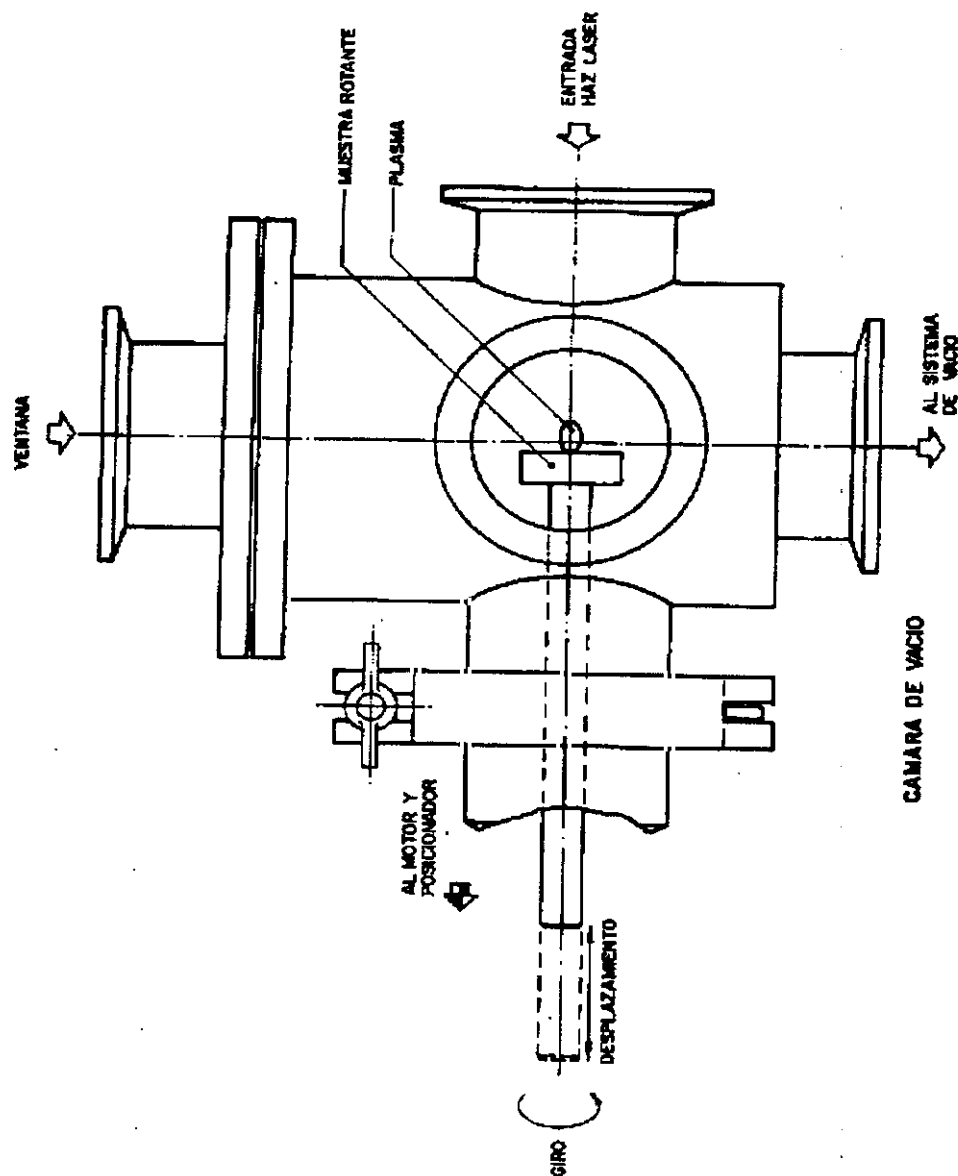


Fig.1A.2. Cámara de vacío en donde se generan los plasmas producidos por láser.

Se ha diseñado y construido otra cámara de vacío (fig.1A.3) para hacer incidir el haz láser a 45° de la normal de la superficie de la muestra. Con este ángulo reducimos notablemente el cráter que se va originando sobre la superficie. En la práctica Carroll et al^{1.4} han comprobado que a 45° tanto de incidencia como de línea de observación del plasma, la radiación ultravioleta medida es máxima. También se reduce la formación de cráter haciendo rotar la muestra, tal y como se indica en la fig.1A.2. La velocidad de rotación es de 5 r.p.m.

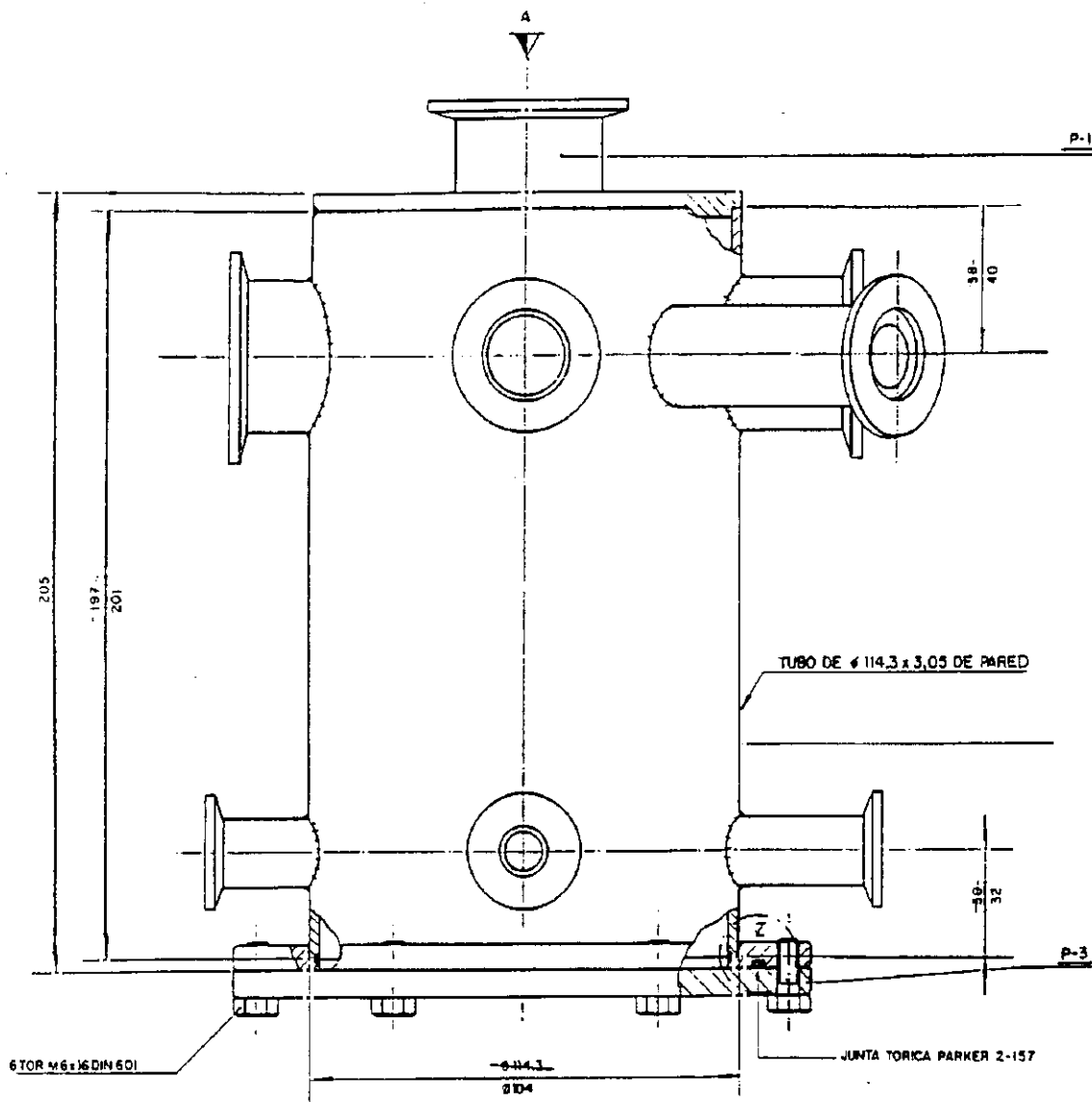


Fig.1A.3. Cámara de vacío con incidencia a 45° .
(a) Vista lateral.

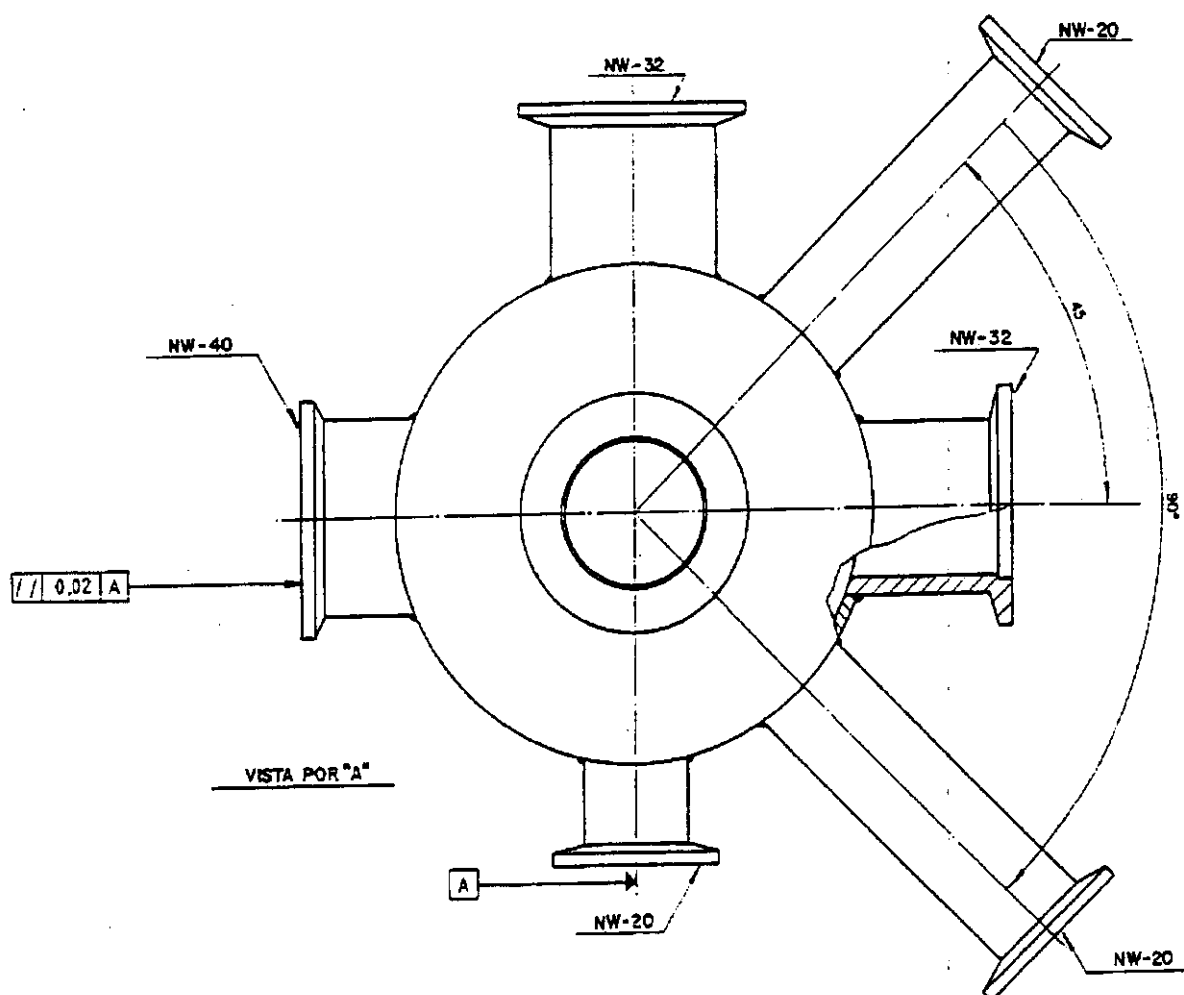


Fig. 1A.3. Cámara de vacío con incidencia a 45°.
(b) Vista desde arriba.

A3. LÁSER DE Nd: YAG

El medio activo de este tipo de láseres es básicamente neodimio triplemente ionizado incorporado a una estructura cristalina, ocupando un 1% en peso y dando lugar a una concentración de 10^{20} átom/cm³ para la mejor acción del láser.

En nuestro caso, la estructura cristalina es $Y_3Al_5O_{12}$ conocida como YAG. Se trata de un material duro y quebradizo con buenas propiedades ópticas, mecánicas y térmicas. Permite producir un haz continuo y de buena calidad a temperatura ambiente, prácticamente imposible con otras estructuras cristalinas.

El neodimio se encuentra dentro de una barra cilíndrica de YAG situada en la cavidad resonante y alineada en la dirección perpendicular a dos espejos. El bombeo óptico se realiza con una lámpara de flash, produciendo impulsos de luz que dan lugar a la excitación de los átomos de neodimio. Las lámparas de bombeo emiten luz en un amplio margen del espectro aunque los iones de neodimio presentan fuerte absorción entre 0.7 y 0.8 μ m. Los fotones absorbidos en este margen, elevan a los iones desde el estado fundamental a otro estado excitado de mayor energía, del cual decaen a un nivel metaestable produciendo la inversión de población. Posteriormente se producirá un decaimiento al estado fundamental que es el que produce la emisión láser.

Dentro de la cavidad resonante se encuentra también el *conmutador de la cavidad* formado por una célula Pockles activada por el sistema electrónico de control. Dicho conmutador permite cortar la cavidad durante el disparo de las lámparas de flash, evitando de este modo la emisión láser durante este período. De esta manera se acumula la mayor cantidad de energía posible en forma de inversión de población. Una vez finalizado el proceso de bombeo, el sistema de control produce un impulso en la célula Pockles haciendo la cavidad transparente. Como consecuencia de ello, se produce una emisión láser muy intensa ya que hay gran cantidad de energía acumulada. El conmutador de la cavidad permite por tanto, obtener impulsos láser de muy corta duración y gran intensidad.

La interacción del tiempo de decaimiento natural y la sección eficaz de emisión y de absorción limita la cantidad de energía que puede ser almacenada en una barra del láser, llegando en nuestro caso a 350 mJ.

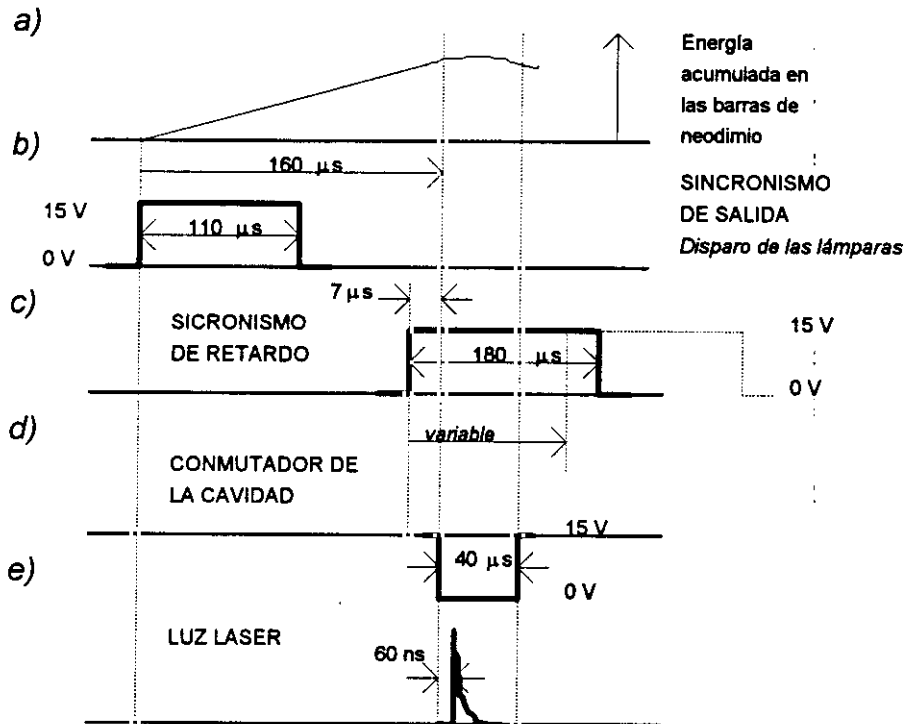


Fig.1A.4. Señales del láser.

Las barras de neodimio van acumulando energía hasta llegar a un máximo, fig.1A.4a), en donde se dispara el CONMUTADOR DE LA CAVIDAD (Q-SWITCH), fig.1A.4d), abriendo las células Pockles, proporcionando nuestro impulso de luz láser, fig.1A.4e).

El comienzo de la señal de SINCRONISMO DE SALIDA (SYNC OUT) está sincronizada con el comienzo de la acumulación de energía en las barras de Nd. Se dispone de una señal de RETARDO SINCRONIZADO (DELAY SYNCH), fig.1A.4c), de retardo variable cuya posición "cero" de la rampa de subida está retrasada 153 μs con respecto al inicio de la señal de SINCRONISMO DE SALIDA.

Debido a que la señal de disparo del *conmutador de la cavidad* es de alta impedancia se han diseñado y elaborado unos circuitos de adaptación de la señal para poder disparar el sistema de detección de luz y fondo (fig.1A.12). Estos circuitos junto con las señales de entrada (alta impedancia) y salida (baja impedancia) se muestran en la fig.1A.5.

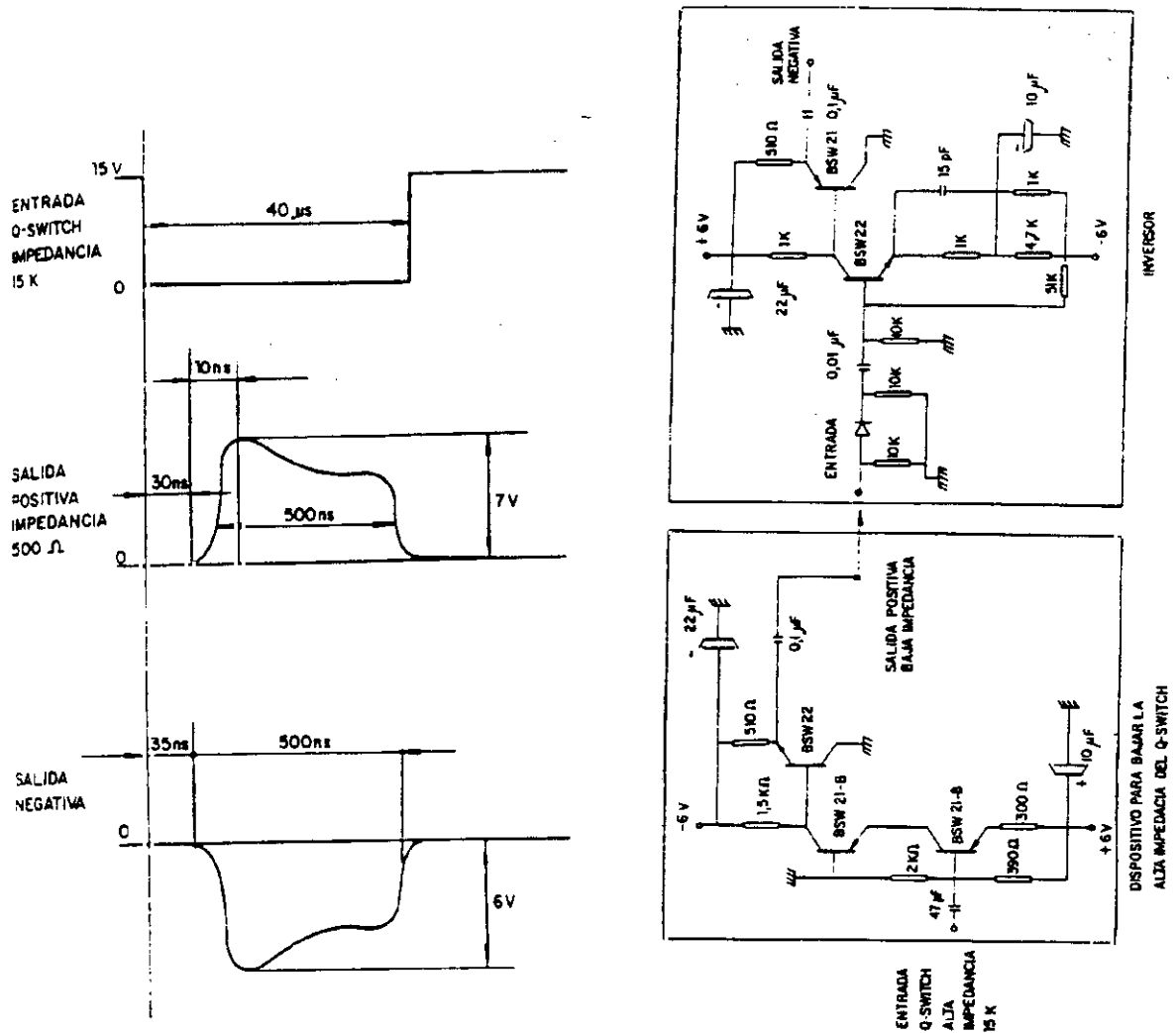


Fig.1A.5. Circuitos de adaptación de la señal del conmutador de la cavidad del láser.

La estructura interna del láser consta de dos partes:

- Cabeza óptica.
- Fuente de alimentación.

La *cabeza óptica* contiene todos los componentes necesarios para la generación del haz láser en el infrarrojo y opcionalmente en segundos, terceros y cuartos armónicos (1064 nm, 532 nm, 355 nm, 266 nm respectivamente).

La *fuentes de alimentación*, además de suministrar la energía necesaria a la cabeza óptica, proporciona todas las funciones lógicas necesarias para operar el láser y la capacidad refrigerante de evacuar el calor generado en la cabeza por la operación de la lámpara flash. Para una mayor flexibilidad en las operaciones del láser, éste contiene una caja de control remoto que está aislada de la cabeza óptica.

Características del haz de salida

- Longitud de onda: 10640 Å
- Energía máxima del impulso: 350 mJ
- Frecuencia máxima: 20 Hz
- Duración del impulso: 7 ns (FWHM)
- Diámetro del haz: 7 mm

El modelo utilizado es el SL404G de *Spectron Laser Systems*.

A4. ESPECTRÓMETRO DE 3M DE INCIDENCIA NORMAL

El monocromador de ultravioleta de vacío utilizado es de incidencia normal. En la fig.1A.6 se detalla el alzado y la planta del mismo. Las rendijas de entrada y salida son fijas y la red se desliza a lo largo de la bisectriz del ángulo formado por las dos rendijas y el centro de la red. Simultáneamente la red gira alrededor de un eje vertical tangente a su centro.

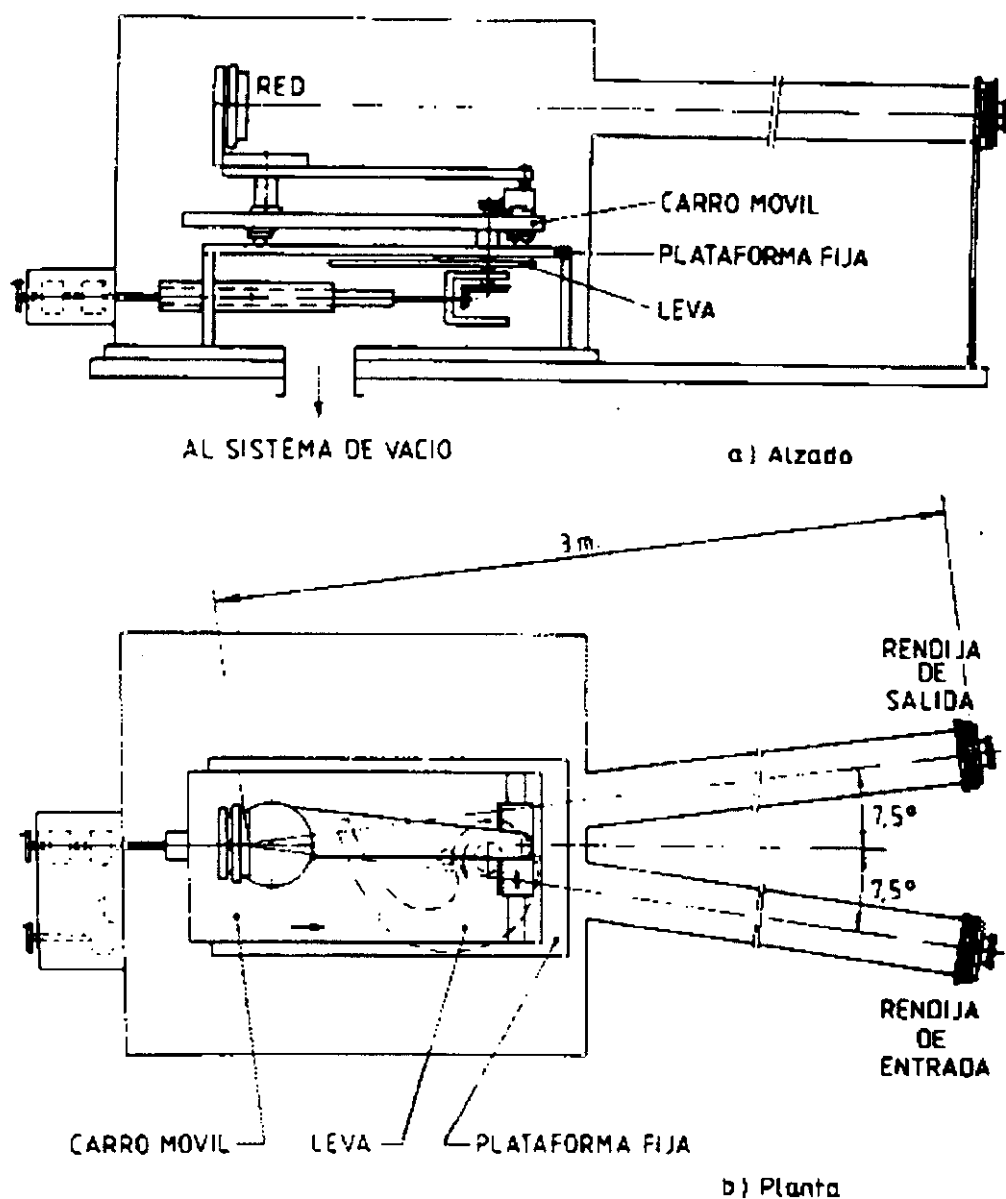


Fig.1A.6. Alzado y planta del monocromador de 3m de incidencia normal.

La rotación de la red (ángulo γ) selecciona la longitud de onda y el desplazamiento (distancia h) proporciona el enfoque. Como se puede apreciar, el montaje es diferente al sistema McPherson descrito por Samson^{1A.5} y también diferente al diseño de Moos et al ^{1A.6} y de Lewis^{1A.7}.

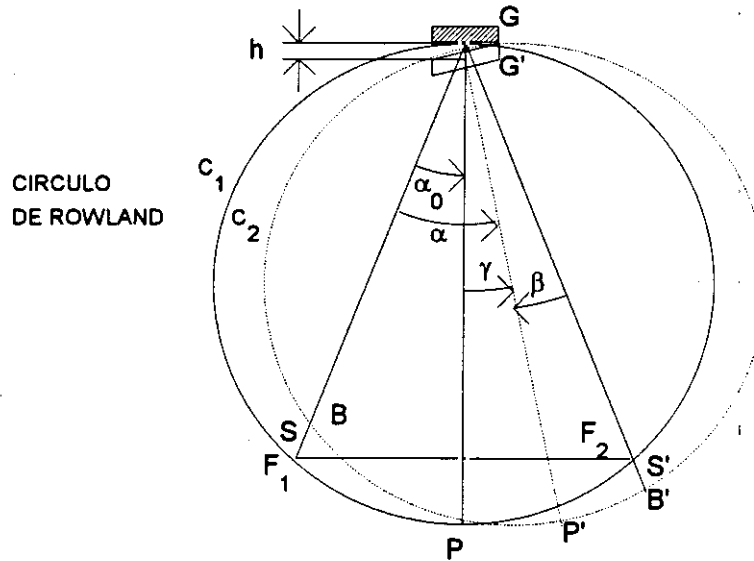


Fig. 1A.7. Posiciones de la red (G y G') para ángulos de incidencia α y α_0 .

$$\begin{aligned} \text{Ángulo de incidencia: } \alpha &= \alpha_0 + \gamma \\ \text{Ángulo de difracción: } \beta &= \alpha_0 - \gamma \end{aligned} \quad (1.1)$$

Se verifica por construcción que $G'F_1 = G'F_2$, es decir que $R \cos \alpha + s = R \cos \beta - s'$, donde R es el radio de curvatura de la red (diámetro del círculo de Rowland).

Según la teoría de focalización de redes cóncavas, Namioka^{1A.8}, la condición de focalización en el plano de dispersión es:

$$\frac{\cos^2 \alpha}{r} - \frac{\cos \alpha}{R} + \frac{\cos^2 \beta}{r'} - \frac{\cos \beta}{R} = 0 \quad (1.2)$$

Donde r y r' son las distancias de la rendija de entrada y de su imagen al centro de la red. Tomemos entonces:

$$r = R \cos \alpha + s$$

$$r' = R \cos \beta - s'$$

Sustituyendo los valores de r y r' en (1.2) y operando, obtenemos finalmente:

$$(s' - s)R \cos \alpha \cos \beta + s' s (\cos \beta - \cos \alpha) = 0$$

Como γ es pequeño el segundo sumando se puede despreciar, obteniendo como condición de focalización:

$$\underline{s = s'} \quad (1.3)$$

Veamos ahora cuánto debe valer h para que al girar la red tengamos una buena focalización. Consideremos que $h \ll R$ para que α_0 no se vea afectado por el desplazamiento h . Según la fig.1A.7:

$$\cos \alpha_0 = \frac{G'F_1}{R-h} = \frac{R \cos \alpha + s}{R-h}$$

$$s = R \cos \alpha_0 - h \cos \alpha_0 - R \cos \alpha$$

Análogamente:

$$\cos \alpha_0 = \frac{G'F_2}{R-h} = \frac{R \cos \beta - s'}{R-h}$$

$$s' = R \cos \beta + h \cos \alpha_0 - R \cos \alpha_0$$

Imponiendo la condición de focalización (1.3), conseguimos una relación para h :

$$\underline{h = R(1 - \cos \gamma)} \quad (1.4)$$

Donde efectivamente volvemos a obtener $h \ll R$ pues γ es un ángulo pequeño.

La red de difracción emplada es holográfica recubierta de platino, de 3m de radio de curvatura, 2400 trazas/mm y 10 cm de diámetro.

$$d = \frac{1}{2400 \text{ trazas/mm}} \quad W = 10 \text{ cm} \quad (1.5)$$

$$R = 3 \text{ m} \quad 2\alpha_0 = 15^\circ$$

A4.1 Mecanismo de movimiento de la red.

La ecuación general de una red es:

$$d (\sin \alpha + \sin \beta) = m \lambda \quad (1.6)$$

Donde α y β son los ángulos de incidencia y difracción respectivamente, d es la constante de separación entre trazas y m es el orden interferencial. Teniendo en cuenta el convenio de signos utilizado en la fig.1A.7 y sustituyendo los valores de α y β dados en (1.1) llegamos a que en primer orden:

$$\lambda = 2d \cos \alpha_0 \sin \gamma = 2d' \sin \gamma \quad (1.7)$$

Un esquema del dispositivo utilizado para mantener la proporcionalidad entre la longitud de onda seleccionada y el ángulo γ girado por la red, se muestra en la fig.1A.8.

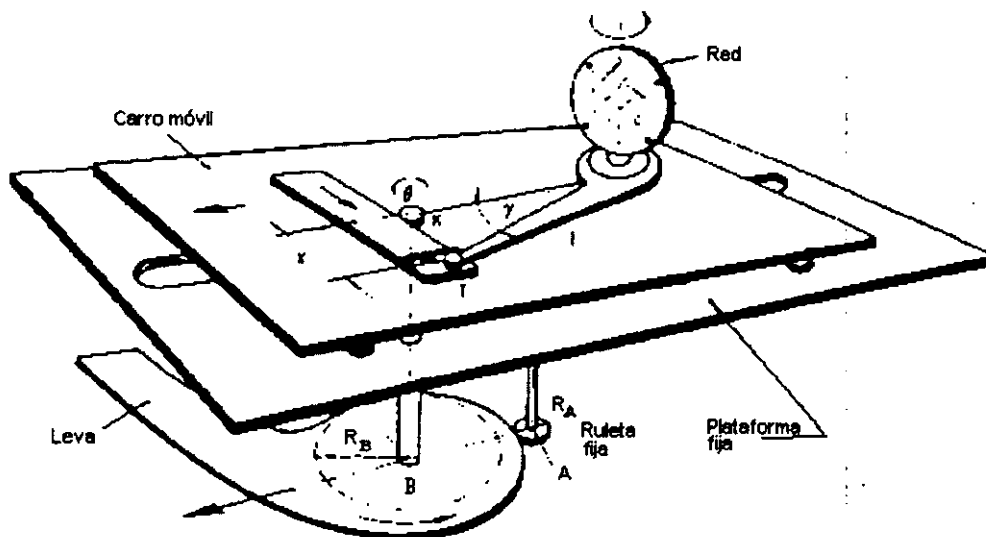


Fig.1A.8. Mecanismo del movimiento de la red.

El piñón K hace que se produzcan dos movimientos simultáneamente. Por un lado desplaza el tope T girando un ángulo γ la red, y por otro lado es solidario a la leva que al girar desplaza el carro móvil una distancia h para obtener un buen enfoque, (ec.1.4).

Según la fig.1A.8 el desplazamiento del carro móvil viene dado por la leva. Si θ es el ángulo que gira el piñón K, que es solidario con la leva, tenemos que la distancia entre los puntos A y B es:

$$R(\theta) = R_A + R_B + h(\theta) + H(\theta) \quad (1.8)$$

$$\text{Donde } h(\theta) = R(1 - \cos \gamma)$$

$$\text{Siendo } \sin \gamma = \frac{X}{l} = \frac{R_K \theta}{l} \quad (1.9)$$

R_K : diámetro del piñón K

$H(\theta)$ es una pequeña corrección debido a que la leva no es tangente a la ruleta fija en el segmento \overline{AB} .

A4.2 Calibración en longitudes de onda.

Como se ha descrito en la sección anterior el desplazamiento lineal de la red determina el grado de focalización y es realizado por el mecanismo de la leva (fig.1A.8). Para el barrido en longitudes de onda la red es rotada por un mecanismo que varía linealmente con el seno del ángulo de giro de la misma (ecuaciones 1.7 y 1.9). La fig.1A.9 muestra que efectivamente se cumple la relación lineal entre la lectura de la longitud de onda del monocromador y la longitud de onda real.

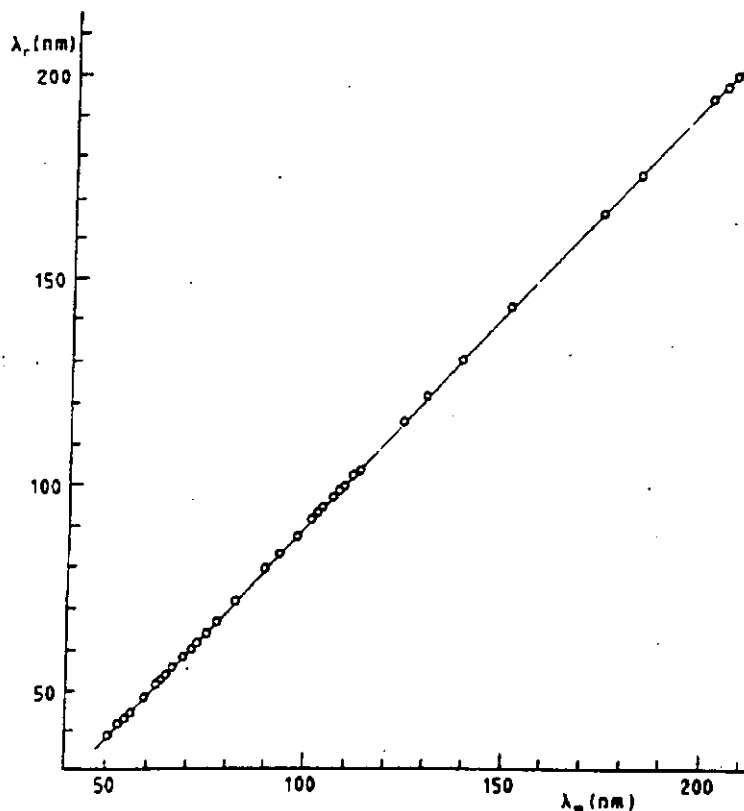


Fig.1A.9. Calibración en longitudes de onda del espectrómetro de 3m.

Las medidas para calibrar en longitudes de onda nuestro espectrómetro han sido realizadas con una lámpara de cátodo hueco utilizando O_2 como gas de llenado.

A4.3 Margen espectral.

La máxima longitud de onda que se puede alcanzar viene dada por el tope T, fig.1A.8, $X_{máx} = 2\pi R_K$. Entonces según (1.9):

$$\text{sen } \gamma_{máx} = \frac{2\pi R_K}{l}$$

Utilizando (1.7) y sustituyendo los valores de los parámetros que tenemos en nuestro espectrómetro obtenemos el margen espectral.

$$\lambda_{\max} = 2d' \sin \gamma_{\max} = 2d' \frac{2\pi R_K}{l} = 2415 \text{ \AA}$$

Donde:

$$d' = d \cos \alpha_0 = \frac{1}{2400 \text{ tr\u00e1zax/mm}} \cos 7.5^\circ = 4.13 \cdot 10^{-4} \text{ mm}$$

$$R_K = 10 \text{ mm} \quad l = 214.9 \text{ mm}$$

A4.4 Astigmatismo.

La aberración más importante de las redes cóncavas es el astigmatismo, debido al cual la imagen de un punto en la rendija de entrada aparece como una línea vertical, es decir el enfoque sólo tiene lugar en el plano horizontal. La longitud de la imagen astigmática viene dada según Samson^{1A.5} por:

$$z = l \frac{\cos \beta}{\cos \alpha} + L [\sin^2 \alpha + \sin \alpha \tan \alpha \cos \beta] \quad (1.10)$$

Donde:

$\alpha = 7.5^\circ + \gamma \rightarrow$ Ángulo de incidencia $l =$ Tamaño de la rendija (entrada)

$\beta = 7.5^\circ - \gamma \rightarrow$ Ángulo de difracción $L =$ Parte iluminada de la red

$\gamma \rightarrow$ Ángulo que gira la red

El primero da la contribución debida a rendija de entrada de altura vertical l y el segundo es el astigmatismo producido por un punto sobre la rendija de entrada. Como se puede ver en la ecuación anterior (1.10) la imagen es tanto menos astigmática cuanto más próximo se esté a la incidencia normal (siendo estigmática cuando $\alpha = \beta = 0^\circ$).

En espectroscopía el astigmatismo puede admitirse ya que sóloamente se precisa un enfoque horizontal para separar las distintas longitudes de onda. Sin embargo debido al astigmatismo, la intensidad de la luz de la imagen por unidad de área disminuye, lo cual no es deseable si se tiene un detector de dimensiones reducidas como son las matrices lineales de fotodiodos cuya altura es de 2.5 mm. Por tanto las técnicas para la reducción del astigmatismo son importantes. La condición de focalización de Sirks^{1A.9} consigue una imagen perfectamente estigmática posicionando la fuente de luz a una distancia adecuada de la rendija de entrada.

A4.5 Resolución espectral.

Se define la *dispersión* de un monocromador como la separación entre dos longitudes de onda (mm/Å). El *poder de resolución* o *resolución espectral* determina si dicha separación puede ser distinguida.

La resolución teórica de un monocromador puede aproximarse por la expresión:

$$\text{Resol. espec.} \approx b \frac{\partial \lambda}{\partial l} \quad (1.11)$$

$b \rightarrow$ Anchura de rendija (mm)

$$\frac{\partial \lambda}{\partial l} \rightarrow \begin{cases} \text{Dispersión lineal recíproca} \\ \text{de la red (Å/mm)} \end{cases}$$

Derivando en la ecuación general de una red (1.6), llegamos a:

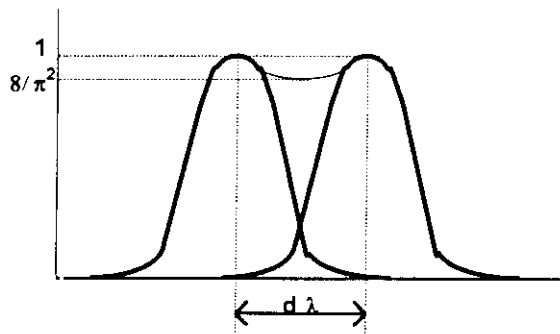
$$\frac{\partial \lambda}{\partial l} = \frac{\partial \lambda}{R \partial \beta} = \frac{d \cos \beta}{R m} \quad (1.12)$$

$R \rightarrow$ Radio de curvatura de la red

$m \rightarrow$ Orden interferencial

La resolución espectral aumenta a medida que disminuye la anchura de la rendija hasta alcanzar el límite de resolución, en donde ya no mejora al disminuir la rendija. Esta resolución está definida para cada longitud de onda. En la práctica no se suele trabajar en el límite de resolución pues se perdería mucha luz. Lo que se hace es llegar a un compromiso entre la cantidad de luz transmitida y la resolución espectral alcanzada.

El límite teórico de resolución viene dado por el criterio de Rayleigh: *Dos líneas de la misma intensidad se empiezan a resolver cuando el máximo de una cae en el mínimo de la otra.* Esto se cumple estrictamente para redes planas. Obsérvese que con este criterio hay una relación de 1 a $8/\pi^2$ entre el máximo y el mínimo de solapamiento.



$$\partial\lambda = \frac{\lambda}{mN} = \frac{\lambda}{m \frac{W}{d}} \quad (1.13)$$

$N \rightarrow$ Número de trazas

$W \rightarrow$ Diámetro de la red

Cuando la red es cóncava los mínimos de las líneas espectrales no alcanzan el cero, de tal manera que no se necesita que el mínimo de una línea caiga en el máximo de la otra para que se cumpla el criterio de Rayleigh. Se adopta el siguiente criterio de Rayleigh modificado: *Dos líneas de la misma intensidad estarán justamente resueltas cuando la diferencia de longitudes de onda entre ellas es tal que la intensidad mínima total entre las líneas es $8/\pi^2$ veces el total de intensidad de ambas en el máximo central de cualquiera de ellas.*

Aplicando (1.13), el límite teórico alcanzable en primer orden por nuestra red, caracterizada por nuestros parámetros dados en (1.5), para una $\lambda = 800 \text{ \AA}$, es de 0.003 \AA . Para alcanzar en la práctica este límite teórico necesitaríamos unas rendijas de $2 \text{ }\mu\text{m}$. Sin embargo, con esta anchura se pierde mucha luz. Por otra parte el detector multicanal utilizado es una matriz lineal de 1024 fotodiodos, cada uno de los cuales tiene $25 \text{ }\mu\text{m}$, con lo cual con una anchura de rendija de entrada inferior a la anchura individual de un fotodiodo no se mejoraría la resolución.

En el presente trabajo se ha utilizado una rendija de $100 \text{ }\mu\text{m}$ obteniéndose en primer orden una resolución de 0.26 \AA .

A5. SISTEMA DE DETECCIÓN ÓPTICA MULTICANAL

Con este tipo de detector se puede cubrir un amplio margen espectral en una misma exposición (35 Å), teniéndose por otra parte una alta sensibilidad y capacidad de resolución temporal. Estas características permiten realizar experimentos en los que se trabaje con baja intensidad luminosa detectándose toda una región espectral con un mismo impulso de luz. En la fig.1A.12 se muestra un esquema del sistema de detección y de toma de datos.

A5.1 Intensificador de imagen.

En nuestro sistema detector hemos instalado una placa microcanal doble (configuración Chevron), Galileo 3025-FM de 25 mm de diámetro sin recubrimiento interior.

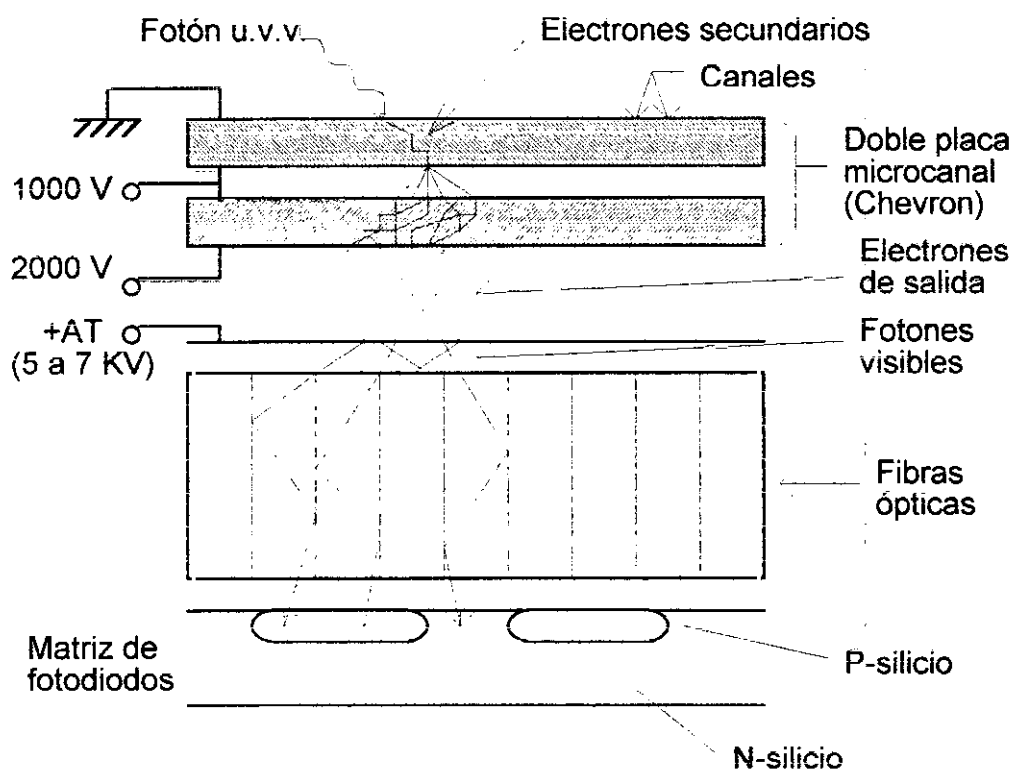


Fig.1A.10. Detector óptico multicanal con intensificador de imagen.

Cada placa microcanal está compuesta por multitud de pequeñísimos tubos de vidrio de aproximadamente $12\text{ }\mu\text{m}$ de diámetro. Como se ve en la fig.1A.10, existe un cierto ángulo entre estos tubos y la superficie de entrada microcanal, que en nuestro caso es de 12° . A los extremos de las placas microcanales se aplica una diferencia de potencial entre 700 V y 1000 V, con lo que se consigue una fuerte aceleración y multiplicación de electrones. La ganancia de la configuración Chevron es de 10^7 - 10^8 .

Las placas microcanales deben trabajar a una presión por debajo de 10^{-6} torr. Con ello se intenta evitar el ruido de fondo debido a los electrones arrancados por iones que se pueden originar, sino se tiene buen vacío, al chocar los electrones producidos en el interior de los tubos con las moléculas de los gases residuales existentes. Por otra parte el ángulo existente entre los tubos de una y otra placa microcanal, fig.1A.10, dificulta que posibles iones producidos en la primera placa pasen a la segunda.

A continuación de las placas microcanales se tiene una pantalla de material luminescente a un elevado potencial para focalizar los electrones, la cual produce una emisión en el visible proporcional a la intensidad de la radiación de U.V.V. incidente. La ganancia total viene dada por el producto de la ganancia óptica de los electrones chocando contra la pantalla luminescente.

A5.2 Matriz de fotodiodos

La luz emitida por la pantalla luminescente es llevada mediante una mazo de fibras ópticas a una matriz lineal de 1024 fotodiodos de $25\text{ }\mu\text{m}$ de ancho por 2.5 mm de largo. Los fotodiodos están polarizados negativamente, de forma que actúan como condensadores cargados. Al incidir sobre ellos la luz procedente del intensificador de imagen, se origina una corriente de electrones y huecos obteniéndose como señal de salida un tren de impulsos proporcionales a la intensidad de luz recibida por cada fotodiodo.

Se ha comprobado con una fuente de emisión continua que la eficiencia relativa de los fotodiodos es la misma con un error del 5%.

A5.3 Sistema de toma de datos.

Detector y tarjeta lectora

La lectura de los fotodiodos se realiza mediante un sistema multiplexor. El circuito equivalente simplificado de la matriz lineal de fotodiodos utilizada se muestra en la fig.1A.11, en donde se puede ver que por cada fotodiodo activo existe un fotodiodo ciego, que no recibe luz, para que la diferencia entre ambas señales permite mejorar la relación señal-ruido.

La tarjeta EG&G RETICON RC1000/RC1001 genera una señal de RELOJ (CLK), de frecuencia ajustable, que determina la velocidad de lectura de los fotodiodos. La señal que determina el comienzo de lectura de los fotodiodos (MSTART), está sincronizada con el disparo del CONMUTADOR DE LA CAVIDAD del láser, que se manda externamente.

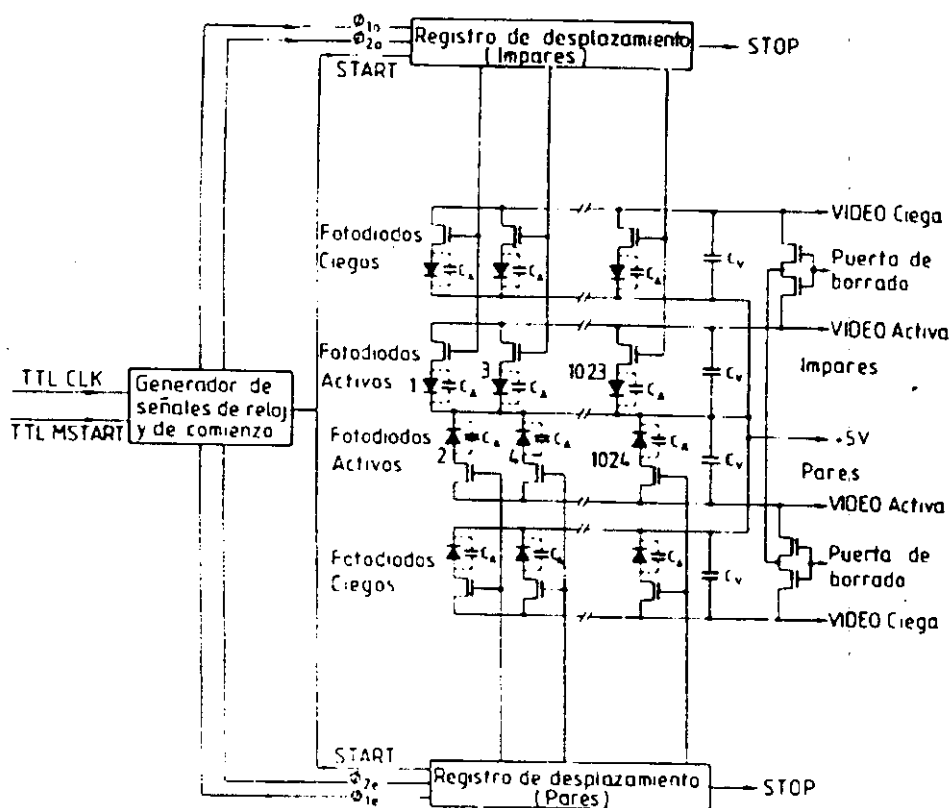
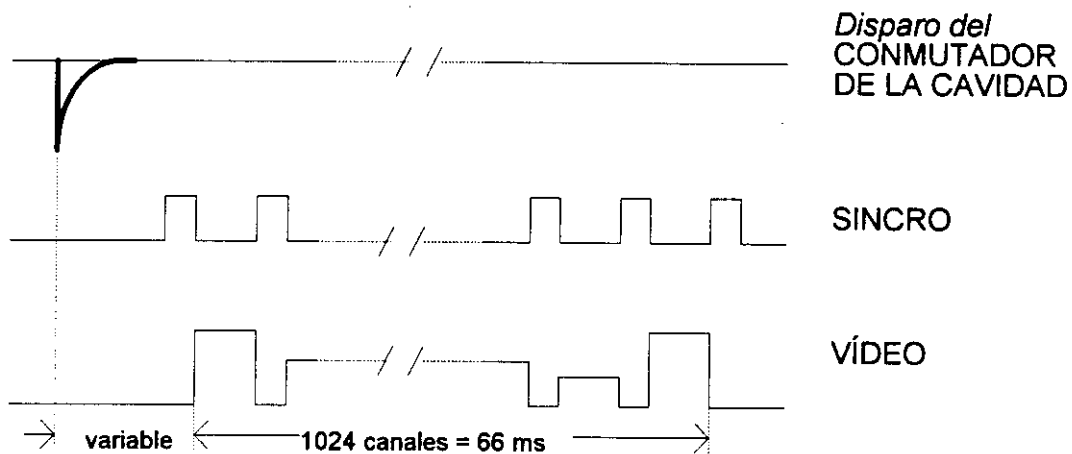


Fig.1A.11. Circuito equivalente de la matriz de fotodiodos EG&G Reticon RL1024SAF.

La señal suministrada por la matriz de fotodiodos es amplificada mediante un amplificador de corriente, teniéndose un tren de impulsos de voltaje. Se tienen dos líneas de vídeo, una de los fotodiodos activos y otra de los ciegos, que son llevadas a un integrador diferencial con el que se obtiene una única señal de vídeo (66 ms de duración y se satura con 6 V).

La señal SINCRO está sincronizada con la de vídeo y permite al ordenador controlar su análisis.



El Reticon recibe un impulso sincronizado con la señal dada por el CONMUTADOR DE LA CAVIDAD del láser que permite la lectura y puesta a cero. También recibe la señal PERMISO que puesta en el nivel bajo inhibe mandar al ordenador la señal SINCRO.

Convertidor analógico digital

La señal de vídeo obtenida al leer la matriz de fotodiodos se digitaliza mediante un convertidor analógico digital Harris HI-574A de 12 bits, el cual tarda un tiempo máximo de 25 μ s en realizar la conversión.

Tarjeta de comunicación con el ordenador

Para la toma de datos se ha utilizado una tarjeta Metrabyte modelo CTM-05 de 5 controladores, adecuada para PC IBM AT y compatibles. Han

sido utilizados dos puertos TTL de 8 bits, uno de entrada y otro de salida, para la comunicación con el ordenador.

Se dispone de un programa en lenguaje ensamblador que realiza la lectura de los 1024 canales, y otro en BASIC que utiliza al anterior y permite utilizar los datos, grabarlos e imprimirlos^{1A.10}.

Las señales utilizadas son todas compatibles TTL y el período de reloj T de la tarjeta lectora Reticon se ha fijado en 65 μ s para conseguir la correcta comunicación entre el Reticon, el convertidor analógico digital y la tarjeta Metrabyte.

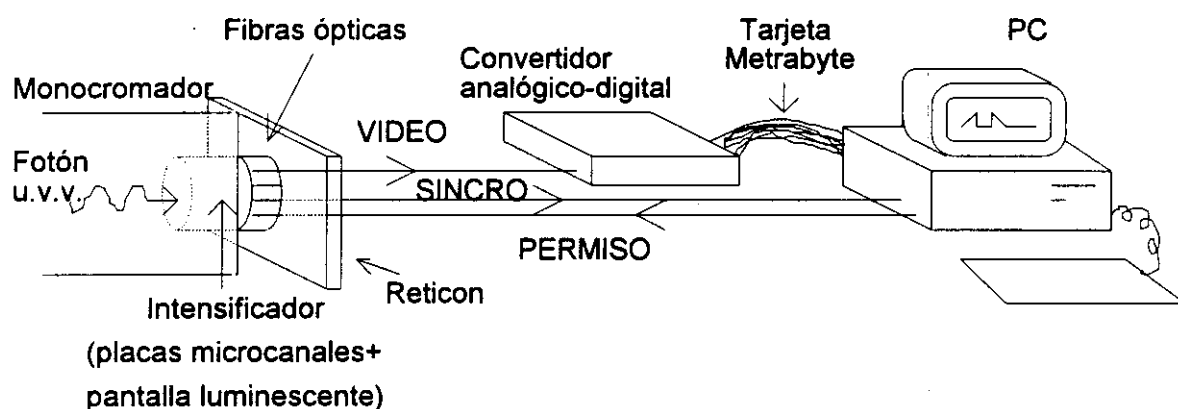


Fig. 1A.12. Esquema del sistema de detección y toma de datos.

Circuitos de sincronismo para el haz láser pulsado

Para conseguir un perfecto sincronismo entre la fuente pulsada de luz y el sistema de detección, obteniéndose una buena relación señal ruido, se ha diseñado y construido la instrumentación electrónica necesaria.

En la fig.1A.13 se muestra un diagrama de tiempos del proceso que tiene lugar entre dos disparos de la fuente de luz. Se toma como señal de disparo exterior la señal Q-SWITCH del láser. Esta señal (1) se retarda 1.2 μ s, tiempo que transcurre entre la señal que proporciona el circuito "trigger" y la emisión de radiación u.v.v. Transcurrido este tiempo, el detector se abre (2) durante 2 μ s, tiempo en que está recibiendo la luz procedente del monocromador. Cuando el detector se cierra (3), aún se esperan 15 ms para

que los fotodiodos recojan toda la luz emitida por la pantalla de material luminescente.

A continuación (4), se procede a la lectura de los fotodiodos para lo que se emplean 66 ms. Una vez finalizado el proceso correspondiente a LUZ (5), se repite a un tiempo $T/2$ (1') entre dos disparos del láser un tiempo T , la misma secuencia, recogiendo la luz del FONDO para descontarla.

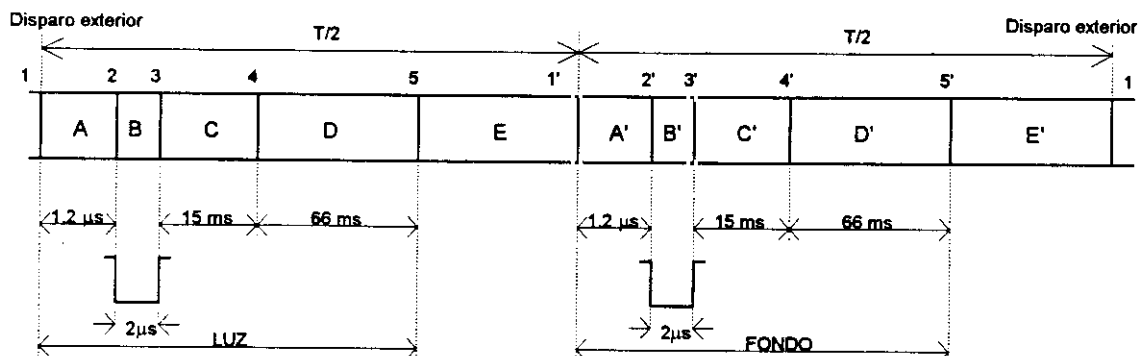


Fig.1A.13. Diagrama de tiempos del proceso de detección de luz entre dos disparos del láser.

Se ha fijado una frecuencia de láser de 3.2 Hz siendo ésta la frecuencia óptima para que le dé tiempo al OMA a leer la señal sin que acumule excesivo fondo.

B. DISPOSITIVO EXPERIMENTAL SISTEMA DE VISIBLE

B1. DESCRIPCIÓN GENERAL

En la fig.1B.1 se muestra un esquema del dispositivo experimental utilizado para medir en el margen espectral del visible. Este dispositivo consta de un láser de Nd:YAG de características idénticas al descrito en la secc.A3; una cámara de vacío donde se generan los plasmas producidos por láser; un monocromador Czerny-Turner de 1m de distancia focal; y un sistema detector OMA III que permite la acumulación y análisis informático de espectros mediante un ordenador personal.

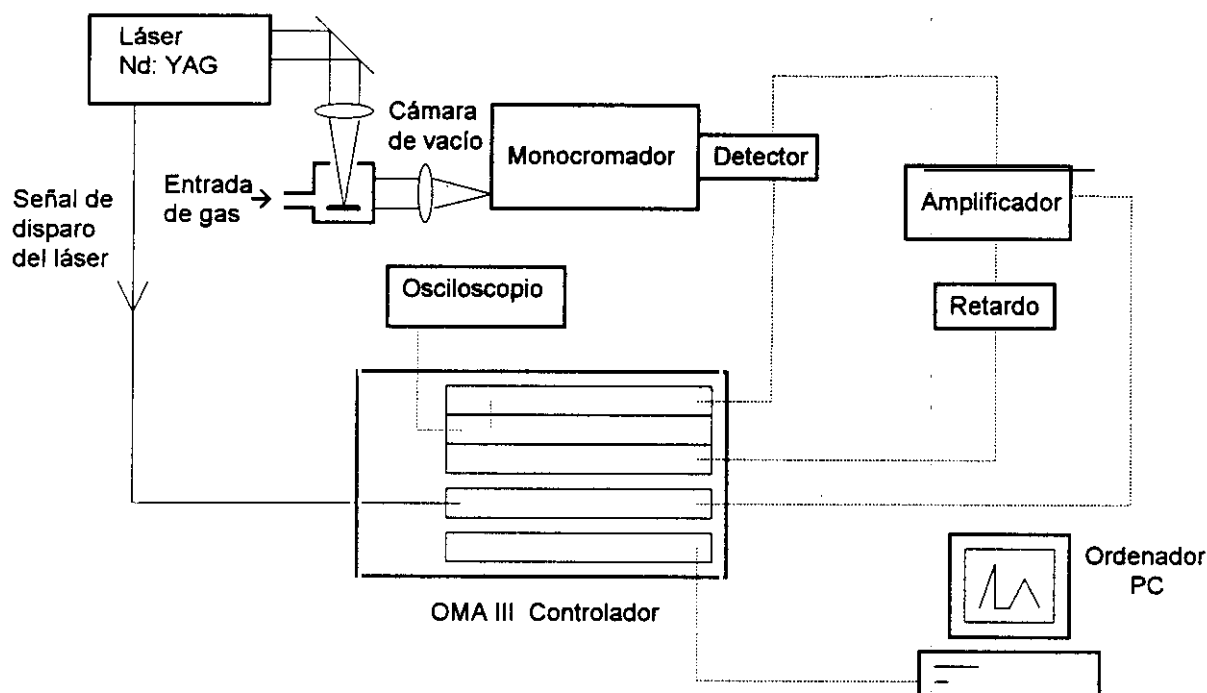


Fig.1B.1. Diagrama de bloques del sistema experimental del visible.

A continuación se explican más detalladamente todas las partes del sistema experimental.

B2. MONOCROMADOR

En el presente sistema experimental se ha utilizado un monocromador Jobin-Ivon de 1m de distancia focal, apertura f/9 y montaje óptico de Czerny-Turner.

Se pueden utilizar tres redes holográficas con diferente respuesta espectral.

- Red ultravioleta: 1700 - 5000 Å y 2400 *trazas/mm*.
- Red visible: 4500 - 8500 Å y 1800 *trazas/mm*.
- Red roja: 6000 - 13000 Å y 1200 *trazas/mm*.

Con la red visible se obtiene una resolución de 0.4 Å con una rendija rectangular de entrada de 50 µm.

En la fig.1B.2 se muestra la respuesta en eficiencia del sistema momocromador-detector para el margen espectral 2800-6900 Å.

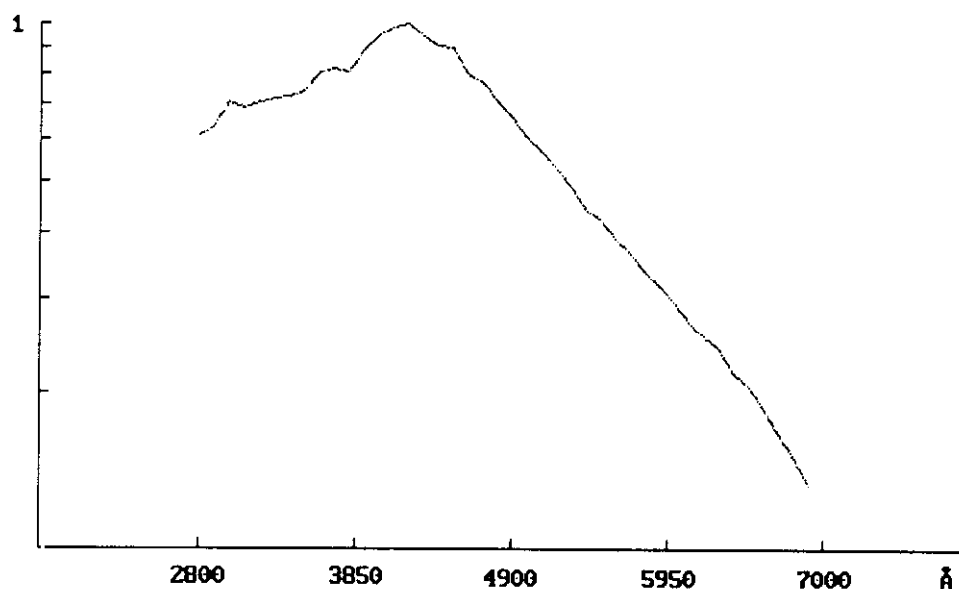


Fig.1B.2. Eficiencia del sistema monocromador-detector en el visible.

El perfil instrumental fue determinado a partir del análisis de varias líneas espectrales estrechas utilizando una lámpara de cátodo hueco de sodio. Estas líneas se ajustan bien a un perfil de Voigt (ec.2.24), teniendo todas ellas una fracción gaussiana del 64%. Midiendo la anchura de estas líneas se ha observado que la anchura instrumental depende ligeramente de la longitud de onda.

$$\Delta\lambda_{instr} = w_0 - \lambda w_1$$

$$w_0 = 3.83 \quad w_1 = 9.828 \cdot 10^{-5}$$

Este perfil instrumental ha sido medido con un error del 3%.

B3. ANALIZADOR ÓPTICO MULTICANAL

El OMA III EG&G modelo 1461 es un equipo extremadamente rápido y potente para el análisis de plasmas producidos por láser. Este sistema permite realizar medidas con resolución temporal, es decir la detección de luz a partir de un cierto instante respecto del impulso láser durante un tiempo predeterminado.

El sistema de adquisición de datos permite almacenar y procesar espectros bajo el control de un ordenador. El sistema completo consiste en una tarjeta CPU de 128 Kb de memoria ROM y 32 Kb de RAM, un detector y un controlador.

A continuación se describen los diferentes componentes del sistema y posteriormente se detallará el proceso de adquisición de datos.

Detector de luz

La luz dispersada por el monocromador se focaliza sobre un intensificador que incorpora un fotocátodo semitransparente que emite electrones cuando inciden fotones sobre él. Éstos son acelerados por una diferencia de potencial existente entre el fotocátodo de entrada y la entrada de la placa microcanal.

A diferencia de la matriz de fotodiodos del sistema de ultravioleta de vacío, en el presente sistema no todos los fotodiodos tienen la misma eficiencia, por lo que es necesario corregir el número de cuentas que da cada uno por una función de eficiencia relativa que unifique en una misma escala el número de fotones incidentes que llega a cada fotodiodo.

Los fotodiodos del detector están sujetos a corriente oscura debido a un transporte de cargas generadas térmicamente, limitando por tanto el tiempo de exposición. Este factor de ruido en el detector depende de la temperatura, reduciéndose en un 50% por cada 7° que desciende ésta. Debido a esto, el detector está equipado con un refrigerante termoeléctrico de *efecto Peltier* que controla la temperatura hasta 5°C. Para descenderla más es necesario hacer circular por el detector un refrigerante adicional. El refrigerante termoeléctrico en el detector puede causar condensación en los fotodiodos y en otras partes sensibles, degradando temporalmente la relación señal ruido y causando problemas en el funcionamiento normal del detector. Por ello es imprescindible hacer circular por el detector nitrógeno seco a 1 atm de presión.

El detector está especialmente diseñado para realizar la apertura del intensificador de imagen en un intervalo de tiempo dado por un generador de impulsos de apertura. Dichos impulsos tienen una amplitud de -200V y su anchura viene dada por el tiempo de recogida de luz elegido.

Generador de impulsos

Este módulo proporciona un impulso cuadrado cuya anchura determina el tiempo que el detector mantiene abierto el intensificador de imagen recogiendo luz. La duración del impulso se prefija mediante un programa de ordenador y puede tomar valores entre 100 ns y 10 ms. Además del tiempo de recogida de luz, controla el momento en el que se produce la apertura del intensificador, proporcionando un retardo entre el disparo que recibe externamente y la generación del impulso de salida. Este retardo está también prefijado por un programa de ordenador que controla el interfaz del detector. El mínimo posible para el retardo es de 70 ns y puede ser aumentado desde 100 ns hasta 13.1 ms.

Amplificador de impulsos

Recibe impulsos TTL del generador de impulsos de apertura proporcionando señales de salida de -200 V de amplitud y de anchura variable dependiendo del tiempo de recogida de luz. La duración del impulso de salida es la misma que la del impulso de entrada. Concidiendo con el comienzo del impulso de -200 V, envía una señal de disparo de 2 μ s de duración al controlador del detector, sincronizando de este modo la apertura del intensificador de imagen con el proceso de recogida y análisis.

Controlador del detector

Contiene tres tarjetas que a continuación se detallan.

Tarjeta controladora del registro

Se comunica con la tarjeta analógica enviándole la información necesaria para saber cómo y cuándo realizar la lectura. Proporciona tres tipos de registros: *Normal*, *rápido* y *agrupado*.

Operando con un registro *normal*, todos los fotodiodos activos son leídos a la misma velocidad. Cada diodo transmite un canal de información al controlador del detector, donde se produce la digitalización de los datos. El registro *rápido* es activado si no se necesita información de un grupo contiguo de canales. En este registro la velocidad del proceso de adquisición de datos aumenta barriendo los fotodiodos rápidamente de tal manera que el sistema no adquiere datos. El registro *agrupado* admite la posibilidad de aumentar la sensibilidad efectiva del interfaz del detector a la incidencia de luz. De esta forma disminuye proporcionalmente la resolución del sistema.

El registro actúa en sincronismo o bien con la red, con el experimento o libremente controlado por un cristal de oscilación interna de 16 MHz. Genera dos señales de salida para disparar opcionalmente cualquier mecanismo externo. Permite también establecer el tiempo de exposición designado por el usuario mediante un programa de ordenador. Éste es el tiempo transcurrido entre dos lecturas consecutivas de un mismo diodo del detector y se compone de tres intervalos.

1. *Tiempo de registro*: Para un registro normal es de 16.43 ms
2. *"Overhead"*: Intervalo de tiempo que necesita el ordenador para preparar una próxima lectura. El mínimo tiempo de exposición es la suma del tiempo de registro y el "Overhead".
3. *Tiempo de integración*: Es el tiempo añadido al mínimo tiempo de exposición para igualar el designado por el usuario. En este período la matriz de fotodiodos no es leída, pero está recogiendo luz. Por tanto, cuanto mayor sea este tiempo, mayor es el flujo de fotones recibidos mejorando la relación señal-ruido.

Tarjeta analógica

Cada diodo registrado en el detector envía un píxel de información al controlador. La señal recibida consta de dos componentes, una procedente de los fotodiodos pares y la otra de los impares. La tarjeta analógica combina las componentes par e impar de la información original procedente de la tarjeta RETICON y da lugar a una señal compuesta de vídeo.

Tarjeta convertidora analógica-digital

Digitaliza la información recibida de la tarjeta analógica, enviando la señal de salida a la interfase del detector, donde son almacenados y analizados los datos. Proporciona una salida de vídeo para utilizarla con un monitor opcional externo (osciloscopio).

Ordenador personal

Almacena los datos enviados por la interfase y permite utilizar programas para el análisis y tratamiento de espectros. Asimismo, el programa suministrado por el fabricante permite enviar a la interfase un conjunto de instrucciones que fijan las condiciones del experimento, tales como el número de espectros a almacenar, las lecturas acumuladas en cada uno, las ventanas temporales, etc...

B4. PROCESO DE ADQUISICIÓN DE DATOS

La secuencia temporal seguida en cualquier proceso de adquisición de datos consta de los siguientes pasos:

1. El usuario prefija a través de un ordenador personal:
 - Un retardo entre el disparo del generador de impulsos de apertura y la generación del impulso de salida.
 - La duración de dicho disparo.
2. El generador de impulsos de apertura es disparado por un impulso electrónico procedente del láser.
3. La señal procedente de la fase anterior es enviada al amplificador.
4. El impulso procedente del amplificador es retrasado 4 ms, abriendo simultáneamente el intensificador de imagen del detector y disparando el controlador. Se ha introducido el retraso del impulso para optimizar los resultados. Si se realiza la lectura de los fotodiodos inmediatamente después del cierre del intensificador se pierde la información que en ese momento esté situada entre el intensificador y los fotodiodos. El retardo permite al controlador dispararse 4 ms después del cierre y por tanto recibir toda la información en el intervalo de tiempo deseado y comenzar el almacenamiento de datos.
5. Entre dos disparos del láser, el controlador dispara internamente al generador de impulsos de apertura. Se repite de nuevo la secuencia anterior y los datos almacenados por este procedimiento son restados de los anteriores. De este modo se quita el fondo en cada uno de los disparos del láser.

Mediante el ordenador personal se indica a la interfase del detector las características que debe tener todo el proceso de detección de luz. Un ejemplo del programa utilizado en este experimento para la obtención de S II en vacío es el siguiente:

'Toma 2 espectros a distintos tiempos en el intervalo 0-10 μ s
 CLR.ALL;CRM 'Borra todas las memorias y área de comandos
 FREQ 50;XS;SC '50hz Red; Ext Syncro; Sourc.Comp(Integrada)
 MEM 1;J 2 'Comenzar en Mem 1;Mem. usadas = 2
 ON/OFF 1;FPW 2E-7 'Amplif on;Gate 200ns
 DAD
 DP 1;MEM 1;SET 0 'Doble precisión;Comienza Mem 1; Pone en marcha el láser
 '20 lecturas previas ignoradas con retardo A 0.1 μ s
 SET.DLY 1E-7;DO 20;IGN;TOUT;IGN;LOOP
 'Lecturas válidas: Suma señal(Disp.láser) y resta fondo (Disp.Software.Tout)
 'Cada renglón es suma de 40 espectros a un tiempo y en una Memoria
 SET.DLY 3.0E-7;DO 100;ADD;TOUT;SUB;LOOP;INC.MEM
 SET.DLY 5.0E-7;DO 100;ADD;TOUT;SUB;LOOP
 CLR 0 ' Detiene el láser
 EXIT

C. FUENTE DE RADIACIÓN UTILIZADA

C1. GENERACIÓN Y DESARROLLO DEL PLASMA

El estudio de la producción de plasmas generados por láser ha recibido especial atención en los últimos 30 años. Por una parte la potencia del láser puede producir materia ionizada a elevada temperatura, presión y densidad, que ha llevado a nuevos estudios teóricos y experimentales sobre los procesos físicos de estos plasmas y sus correspondientes ecuaciones de estado. El desarrollo de métodos espectroscópicos como técnica de diagnóstico de plasmas ha encontrado gran aplicación en varios campos de la física como por ejemplo la fusión controlada o el análisis de elementos. También los plasmas producidos por láser han sido fuentes versátiles para el estudio del espectro de emisión de átomos muy ionizados. Las tendencias de las series isoelectrónicas en estos espectros combinadas con cálculos *ab initio* realizados multiconfiguracionalmente, ha permitido hacerse una idea de los efectos de la ionización creciente en la estructura atómica.

La evolución temporal y espacial del plasma inmediatamente después de su formación debe ser estudiada para identificar la mejor ventana de tiempos, pudiendo cuantificar espectroscópicamente en distintas ventanas, distintos grupos de elementos en diversas condiciones de radiación.

El plasma surge perpendicularmente a la superficie del blanco. La irradiancia (W/cm^2) mínima depende de la longitud de onda y de la capacidad de absorción de la luz por parte de la superficie. Un valor típico de este límite es del orden de $10^9 \text{ W}/\text{cm}^2$. Se pueden distinguir dos fases en la evolución del plasma.

- 1) Iniciación y desarrollo del plasma durante el impulso láser.
- 2) Desarrollo del plasma después del impulso láser.

C1.1 Iniciación y desarrollo del plasma durante el impulso del láser

Focalizando un impulso de un láser de alta potencia sobre un blanco sólido se inicia una secuencia de complicados procesos que dependen, principalmente, de la duración, longitud de onda e irradiancia del impulso, junto con las propiedades térmicas del blanco. El intenso calentamiento local experimentado por el blanco causa un rápido aumento de la temperatura superficial del material de unos 10^{10} K s^{-1} . El calor se conduce al interior del blanco y una fina capa de material fundido se forma debajo de la superficie (fig.1C.1a). A medida que la energía depositada en la superficie aumenta, se alcanza el punto en la que ésta excede el calor latente de vaporización. Cuando esto ocurre el calor no puede disiparse del punto de irradiación lo suficientemente deprisa llegándose al punto de ebullición, ocurriendo la evaporación. La temperatura superficial es entonces determinada por el proceso de evaporación y el principal efecto de la conducción de calor es preservar una fina capa de material fundido debajo del frente de evaporación (fig.1C.1b).

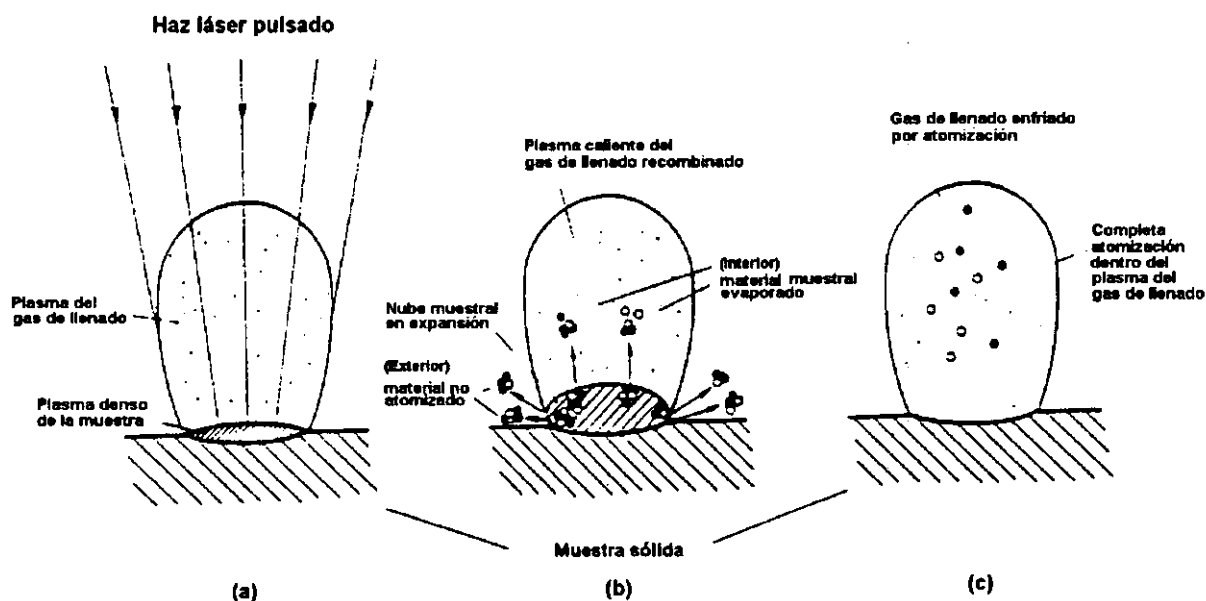


Fig.1C.1. Diagramas de los procesos de ablación y atomización de la radiación láser.

Una vez que la evaporación está establecida sobre la superficie del sólido, el subsiguiente comportamiento del plasma está regido por los procesos dinámicos de los gases.

Durante el impulso del láser las especies atómicas interactúan con el mismo excitándose e ionizándose. Debido a la gran densidad de radiación láser durante estos primeros instantes, la ionización se produce por absorción multifotónica. Este proceso de ionización genera los primeros electrones libres que son acelerados absorbiendo la energía luminosa del láser mediante un proceso de *Bremsstrahlung* inverso, en la que los electrones toman energía de los fotones aumentando su energía cinética. Cuando el electrón progresivamente acelerado ha alcanzado la energía de ionización y choca con un átomo neutro, éste se ioniza obteniéndose un electrón de baja energía que reinicia el proceso de absorción y aceleración. La ionización del gas se produce de esta forma rápidamente en cascada. Esta fuerte ionización produce electrones libres que colisionan con las partículas y dan lugar a un aumento de la temperatura y presión del gas formado por evaporación. El calentamiento continúa hasta que la densidad de electrones es lo bastante elevada para calentar el gas. Los electrones calentados aumentan la temperatura del plasma y la densidad electrónica. Se producen átomos altamente ionizados con gran energía cinética (con velocidades típicas de 10^9 cm/s). Las especies muy ionizadas se concentran en el eje del plasma mientras que las partículas neutras y los átomos menos ionizados se expanden radialmente. Cuando cede el impulso láser el plasma es ópticamente denso con una temperatura superficial del orden de 10^4 - 10^5 K. A partir de este momento el plasma se va enfriando y la emisión de líneas espectrales tiende a dominar los procesos de radiación (fig.1C.1c). Este plasma mantiene una cierta energía de reserva durante el período que sigue al impulso.

En los plasmas generados por láseres en *modo de conmutador de la cavidad*, *Q-SWITCH*, las presiones de ablación son tan altas (10 GPa); consecuentemente la evaporación ocurre a temperaturas significativamente por encima del punto de ebullición del material. Correspondientemente el grueso del material quitado se convierte en vapor, resultando cráteres poco profundos de unos pocos μm .

La expansión del plasma depende fuertemente del medio que lo rodea, Lida^{1C.1}. Si el plasma se genera en un gas de llenado, el proceso de expansión se ve afectado por la interacción de las partículas del plasma formado en el blanco con las del gas de fondo, parcialmente ionizado por la intensa emisión ultravioleta asociada con la formación del plasma.

En vacío se ha comprobado que la duración del plasma es menor que en aire. Para el modo de láser QS e impulsos de 7 ns de anchura el plasma tiene una duración en vacío ≈ 100 ns.

C1.2 Desarrollo del plasma después del impulso láser

En este período, el centro del plasma es desplazado de la superficie del blanco produciéndose un enfriamiento y una expansión del mismo.

Este es el período en el que se llevan a cabo experimentos espectroscópicos destinados al análisis de elementos pues se produce una transición de emisión continua (recombinación y Bremsstrahlung) a un espectro de líneas de emisión. Por tanto, es en este último período en el que vamos a centrar nuestro estudio. La duración total de la emisión de luz en vacío es del orden de 100 ns. Dependiendo también de la distancia a la que se observa el plasma respecto de la superficie de la muestra, obtenemos distintos grados de ionización y de continuo.

Los estudios realizados pretenden relacionar el plasma con la composición elemental de la muestra, además de conocer la distribución de átomos, moléculas y partículas agregadas. Como resultado de estos estudios se deduce la formación de átomos libres a partir de una violenta vaporización del blanco.

Entre la bibliografía existente sobre plasmas y sus aplicaciones se pueden citar los trabajos publicados por Radziemski y Cramers^{1C.2} y Carroll y Kennedy^{1C.3}.

En nuestro dispositivo experimental conseguimos la formación del plasma enfocando el haz láser de Nd:YAG, descrito anteriormente, sobre el blanco. En el montaje para el ultravioleta de vacío la radiación emitida por el plasma es analizada en la dirección perpendicular a la expansión de dicho plasma a 20 cm de distancia de la rendija de entrada del espectrómetro de U. V. V. En el montaje para la radiación visible la pluma del plasma es analizada en la dirección de expansión de la misma a 5 cm de la rendija de entrada.

C1.3 Equilibrio termodinámico local

La compleja interrelación entre las líneas de emisión de un plasma y sus constituyentes depende de si el plasma está en equilibrio térmico con sus alrededores. Debido a la rápida evolución de las plasmas producidos por láser, éstos son inhomogéneos y existen diferentes temperaturas y densidades de electrones en cada una de sus regiones. Las poblaciones atómicas e iónicas son funciones que varían rápidamente en el tiempo y en el espacio, y la temperatura del plasma muestra esta variación. Por tanto, el equilibrio termodinámico sólo puede ser supuesto que permanezca en un determinado punto y tiempo del desarrollo del plasma. Para que ocurra este equilibrio termodinámico local LTE, Griem^{1C.4}, las colisiones deben dominar a otros procesos de transferencia de energía (como decaimiento radiativo o recombinación). En un vapor parcialmente ionizado, las colisiones por electrones será el mecanismo dominante de transferencia de energía debido a sus altas velocidades y a la interacción coulombiana de largo alcance. En este punto una única temperatura, la *temperatura de los electrones*, define la población de los estados excitados en los distintos iones, así como el grado de ionización del plasma. La relación entre la temperatura y las poblaciones de los niveles excitados en este régimen de LTE, viene dada por una distribución de Boltzmann; y la población relativa de las distintas especies iónicas sigue la ley de Saha.

De todas formas, las poblaciones de los niveles resonantes de la mayor parte de los constituyentes del plasma están casi siempre establecidos por procesos radiativos. Además estas líneas resonantes también suelen acusar una fuerte autoabsorción.

En el borde del plasma, el proceso físico dominante es su expansión. En estas regiones la temperatura del plasma puede ser indefinida porque un estado de equilibrio termodinámico local no puede existir si la densidad de electrones es baja (ec.1.14), y el tiempo de colisión es del orden de magnitud del intervalo de tiempo durante el cual las condiciones del plasma sufren cambios significativos.

A continuación se presentan dos criterios para saber si estamos en condiciones de equilibrio termodinámico local, Thorne^{1C.5}:

$$N_e \gg 1.6 \times 10^{12} T^{1/2} (\Delta E)^3 \text{ cm}^{-3} \quad (1.14a)$$

y Griem^{1C.7}:

$$N_e \gg 9 \times 10^{17} \left(\frac{kT}{13.6} \right)^{1/2} \left(\frac{\Delta E}{13.6} \right)^3 \text{ cm}^{-3} \quad (1.14b)$$

$N_e \rightarrow n^\circ$ de electrones en cm^{-3}

$\Delta E \rightarrow$ Diferencia de energía entre dos niveles en eV

El criterio dado por Thorne exige para el equilibrio termodinámico local una densidad de electrones mayor que el criterio dado por Griem.

C2. LÍNEAS ESPECTRALES EN UN PLASMA PRODUCIDO POR LÁSER

C2.1 Intensidad de línea

Consideremos el caso más simple en el que tenemos un medio isótropo con equilibrio termodinámico local.

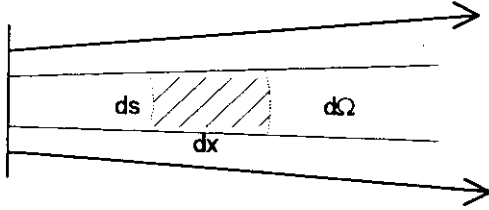


Fig. 1C.2a) Emisión de una línea espectral dentro del plasma.

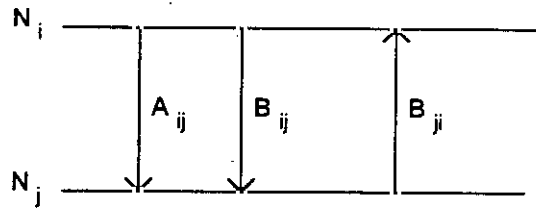


Fig. 1C.2b) Población de niveles mediante transiciones radiativas.

Tenemos, según la fig. 1C.2, dos contribuciones positivas y una negativa a la intensidad diferencial de línea.

$$\begin{aligned} \frac{dI(x)}{dx} d\Omega ds dv dt = & -h\nu N_j B_{ji} P(\nu) \frac{I(\nu)}{c} d\Omega ds dv dt + \\ & + h\nu N_i B_{ij} P(\nu) \frac{I(\nu)}{c} d\Omega ds dv dt + A_{ij} h\nu N_i P(\nu) \frac{d\Omega}{4\pi} ds dv dt \end{aligned}$$

Donde la intensidad $I(\nu)$ viene dada en unidades de potencia. Hemos tenido en cuenta que los fotones emitidos por emisión espontánea se emiten por igual en todas las direcciones por lo que hay que tomar la fracción de ángulo sólido $d\Omega/4\pi$. El perfil de línea es $P(\nu)$, centrado en ν_{ij} y normalizado a la unidad.

$$\int_{\nu_{ij}-\infty}^{\nu_{ij}+\infty} P(\nu) d\nu = 1$$

$$\frac{dI(x)}{dx} = h\nu (N_i B_{ij} - N_j B_{ji}) P(\nu) \frac{I(\nu)}{c} + A_{ij} h\nu N_i P(\nu) \frac{1}{4\pi}$$

Si hay equilibrio termodinámico (al menos local) los niveles atómicos se pueblan según la distribución de Boltzmann:

$$N_j = N \frac{g_j}{Z(T)} e^{-E_j/KT} \quad (1.15)$$

Donde $Z(T) = \sum_j g_j e^{-E_j/kT}$, es la función de partición.

Aplicando las relaciones entre los coeficientes de Einstein:

$$\left. \begin{aligned} g_i B_{ij}(\nu) &= g_j B_{ji}(\nu) \\ A_{ij}(\nu) &= \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} B_{ij}(\nu) \end{aligned} \right\} \Rightarrow B_{ji} = \frac{g_i}{g_j} \frac{c^3}{8\pi h\nu^3} A_{ij}$$

Sustituyendo la intensidad de la distribución de Planck:

$$I(\nu, T)_{Planck} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

y definiendo el coeficiente de absorción como:

$$k(\nu) = \frac{h\nu}{c} \frac{P(\nu)}{N_j B_{ji} (1 - e^{-h\nu/kT})} \quad (1.16)$$

Tenemos que:

$$\frac{dI(\nu)}{dx} = k(\nu) (I(\nu, T)_{Planck} - I(\nu))$$

En un medio homogéneo (donde T no depende de x), sin fuentes externas:

$$I(\nu) = I(\nu, T)_{Planck} (1 - e^{-K(\nu).D}) \quad (1.17)$$

El espesor óptico es $k(\nu).D$. Si este espesor óptico lo consideramos delgado,

$$k(\nu).D \ll 1 \quad (1.18)$$

entonces podemos desarrollar la exponencial del integrando hasta primer orden llegándose a la siguiente expresión para la intensidad integral:

$$I_{ij} = \frac{A_{ij}}{4\pi} \underbrace{DN \frac{g_i}{Z(T)}}_{N_i} e^{-E_i/kT} \quad (1.19)$$

En donde, la intensidad aparece en fotones.s⁻¹.

Por tanto, la intensidad de una línea espectral, suponiendo equilibrio termodinámico local y un espesor óptico delgado, es proporcional a la probabilidad de emisión espontánea y a la población del nivel superior.

$$I_{ij} \propto N_i A_{ij} \quad (1.20)$$

Tomando logaritmos naturales en (1.19), tenemos:

$$\ln\left(\frac{I_{ij}}{A_{ij} g_i}\right) = -\frac{E_i}{kT} + \ln\left(\frac{DN}{4\pi Z}\right) \quad (1.21)$$

Para especies dadas, el último término de la ecuación (1.21) es constante, por tanto representando $\ln(I/Ag)$ frente E_j , para un número de líneas espectrales obtenemos un *diagrama de Boltzmann*. Si estamos en condiciones de equilibrio termodinámico local podremos ajustar por mínimos cuadrados estos puntos a una línea recta de pendiente $-1/kT$, con la que se puede calcular la temperatura electrónica.

C2.2 Coeficiente de autoabsorción

El coeficiente de autoabsorción en una determinada transición viene dado por la expresión dada por Corney^{1C.6}

$$k_{ji} = g_i \frac{A_{ij}}{4\pi^2 c Z(T)} N e^{-E_j/kT} (1 - e^{-\Delta E/kT}) \frac{\lambda_{ij}^4}{\Delta \lambda_{ij}} \quad (1.22)$$

Evaluando k y estimando el espesor de la fuente D , podremos comprobar si tenemos un plasma ópticamente delgado pues ha de verificarse la condición dada en (1.18)

$$k.D \ll 1$$

REFERENCIAS CAPÍTULO 1

Parte A

- 1A.1 V. Schumann, *Akad. Weiss. Wien*, **102**, 2A, 625 (1893).
- 1A.2 T. Lyman, *Astrophys. J.*, **5**, 349 (1906).
- 1A.3 R. Tousey, *Appl. Optics*, **1**, 679 (1962).
- 1A.4 P. K. Carroll, E. T. Kennedy, G. O'Sullivan, *IEEE, J. Quant. Electron.* **QE-19**, 1807 (1983).
- 1A.5 James A. R. Samson, *"Technique of Ultraviolet Spectroscopy"*, John Wiley & Sons, Inc., NY (1967).
- 1A.6 H. W. Moos, K. I. Chen, J. L. Terry and W. G. Fastie, *Appl. Opt.* **18**, 1209 (1979).
- 1A.7 B. R. Lewis, *Appl. Opt.* **21**, 2523 (1982).
- 1A.8 T. Namioka, *Journal of the Optical Society of America*, **49**, 446 (1959).
- 1A.9 P. Martín, C. Peraza, F. Blanco y J. Campos, *Informe CIEMAT 716*, 18 (1993).
- 1A.10 P. Martín, C. Peraza, F. Blanco, J. Campos, *Informe CIEMAT 716*, Apéndices (1993).

Parte C

- 1C.1 Y. Lida, *Spectrochemical Acta*, **45B**, 1353 (1990).
- 1C.2 L. J. Radziemski y D. A. Cramers, *"Laser induced plasmas and applications"* (1989).
- 1C.3 P. K. Carroll y E. T. Kennedy, *Contemp. Phys.* **22**, 61 (1981).

- 1C.4 Hans R. Griem *"Plasma Spectroscopy"*. McGraw-Hill. NY. cap 6 (1964).
- 1C.5 A. P. Thorne, *"Spectrophysics"*, Cap.11 (1974).
- 1C.6 A. Corney, *"Atomic and Laser Spectroscopy"*, Claredon Press. Oxford, 291 (1977).
- 1C.7 Hans R. Griem *"Plasma Spectroscopy"*. McGraw-Hill. NY. (1980).

CAPÍTULO 2

**APLICABILIDAD DE LA EMISIÓN DE UN
PLASMA PRODUCIDO POR LÁSER A LA
CALIBRACIÓN DE LA EFICIENCIA DE UN
ESPECTRÓMETRO DE U.V.V.**

INTRODUCCIÓN

Diferentes técnicas han sido desarrolladas y usadas para la medida de intensidades de líneas espectrales en el margen espectral del ultravioleta de vacío, lo cual indica que hay ventajas y limitaciones en cada una de ellas.

Principalmente, hay dos métodos de calibración en eficiencia posibles:

- a) La sustitución de la fuente desconocida por una fuente patrón en el mismo dispositivo experimental.
- b) El uso de un detector absoluto en conjunción con un espectrómetro cuya respuesta haya sido previamente determinada.

La técnica (a) es más utilizada porque sólo incluye una fuente de comparación. Muchos tipos de fuentes de calibración han sido desarrolladas siendo complementarios entre sí. Estas fuentes son arcos de cuerpo negro, arcos de hidrógeno y sincrotrones como estándares primarios. Como estándares de transferencia o de trabajo se encuentran las lámparas de deuterio y los mini-arcos de argón. Como complemento a estas fuentes la técnica de razones de ramificación se ha venido aplicando y es uno de los métodos que ha sido usado en el presente trabajo. Todos estos métodos tienen limitaciones respecto a los márgenes espectrales de aplicación, precisión, conveniencia, etc..., así que las mejoras en cada aproximación es muy deseable.

Las líneas más intensas de la mayoría de los átomos y prácticamente de todos los iones se encuentra principalmente en el ultravioleta de vacío. La medida de probabilidades de transición en este margen espectral es de gran importancia en física de plasmas y astrofísica. Para comparar la intensidad de líneas espectrales en diferentes longitudes de onda, es necesario conocer la eficiencia relativa de nuestro sistema espectrométrico. La calibración de sistemas ópticos en el margen espectral del ultravioleta de vacío para longitudes de onda menores que 1050 Å es complicada por la ausencia de fuentes estándar convenientes de intensidad adecuada. Debido a la dificultad de transportar el sistema experimental a una fuente de radiación sincrotrón, el experimentador está obligado a proyectar un esquema *in situ* que pueda ser

usado periódicamente. Una alternativa, referida como técnica de las *razones de ramificación*, hace uso de cálculos o medidas experimentales de probabilidades de transición moleculares o atómicas, para evaluar globalmente la respuesta del sistema a partir de razones de intensidades de líneas. Disponer de un conjunto de valores fiables de razones de probabilidades de transición, con el que comparar las medidas de intensidades de líneas, es de gran utilidad para la calibración de espectrómetros en el ultravioleta de vacío.

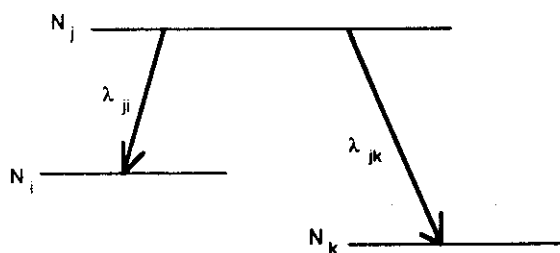
A. TÉCNICAS DE CALIBRACIÓN EMPLEADAS

A1. RAZONES DE RAMIFICACIÓN

La técnica de las razones de ramificación ha sido probablemente el método que más ampliamente usado debido a su simplicidad. Esta técnica está basada en la observación de una pareja de líneas espectrales que parten del mismo nivel superior y su comparación con valores conocidos de razones de probabilidades de transición. Sugerido en los primeros años de la década de los 60 independientemente por Griffin y McWhirter^{2.1} y por Hinnov y Hofmann^{2.2} e inmediatamente aplicado por ellos a grandes máquinas de plasmas como ZETA y el C-Stellarator, ha sido seguidamente usado prácticamente en todos los dispositivos de plasmas de altas temperaturas que requerían dicha calibración. En los últimos años esta técnica de calibración ha sido usada por Yang y Cunningham^{2.3} utilizando como fuente de luz gases de baja presión excitados por impacto de electrones; Bastert et al^{2.4} usando la técnica de "beam foil" y Sato et al^{2.5} usando un plasma de helio estacionario en el que son introducidos gases de nitrógeno y oxígeno.

En el presente trabajo se ha hecho un amplio estudio de valores, tanto experimentales como teóricos, de razones de probabilidades de transición de los últimos 20 años (tabla 2.1). Se ha elaborado, por tanto, un compendio de razones de probabilidades de transición de carbono, oxígeno, nitrógeno y azufre ionizados, para ser utilizado en la calibración de espectrómetros entre 386 Å y 1337 Å.

Si estamos en condiciones de equilibrio termodinámico local y el plasma es ópticamente delgado la intensidad de una línea espectral es proporcional a la población del nivel superior y a la probabilidad de transición. Para transiciones que se originan desde un nivel superior común podemos obtener por tanto, la siguiente razón de intensidades:



$$I(\lambda_{ji})_{aparente} = I(\lambda_{ji})_{real} \varepsilon(\lambda_{ji}) \propto N_j A_{ji} \varepsilon(\lambda_{ji})$$

$$\frac{I(\lambda_{ji})_{ap}}{I(\lambda_{jk})_{ap}} = \frac{\varepsilon(\lambda_{ji}) A_{ji}}{\varepsilon(\lambda_{jk}) A_{jk}}$$

Como intensidad aparente de una línea se ha considerado el área de la misma ajustada a un perfil de Voigt, Armatrong^{2.6}, Kielpopt^{2.7}. La función eficiencia $\varepsilon(\lambda)$, la determinamos midiendo las razones de intensidades aparentes de parejas de líneas que parten de un mismo nivel superior, supuestas conocidas las probabilidades de transición.

La principal dificultad consiste en encontrar en el margen espectral de interés suficiente número de pares de líneas de las cuales se conozcan con precisión valores de probabilidades de transición.

A2. FUENTE DE EMISIÓN CONTINUA

Los espectros continuos de emisión de plasmas producidos por láser han encontrado una gran diversidad de aplicaciones. Entre ellas podemos destacar la litografía de rayos X blandos de alta resolución, medidas de reflectividad en el ultravioleta de vacío-rayos X blandos, espectroscopía fotoelectrónica y microscopía de contacto.

Actualmente la excelente reproducibilidad disparo a disparo ha convertido a los espectros continuos en unos prometedores candidatos para ser una fuente radiométrica estándar en el ultravioleta de vacío. La determinación de la irradiancia espectral de los continuos de las tierras raras entre 1150-2000 Å, O'Sullivan et al^{2.10-2.11}, de los plasmas de wolframio entre 70-1000 Å y de los plasmas de cobre entre 20-80 Å, Fischer et al^{2.12}, son los que han sido estudiados en la última década.

Con una irradiancia $\geq 2 \cdot 10^{11}$ W.cm⁻² la radiación de recombinación en el plasma es la fuente de continuo dominante en el margen de rayos X y ultravioleta de vacío, mientras que la contribución debida a la radiación de líneas se ve reducida por la opacidad del plasma. El Bremsstrahlung contribuye solamente con un 20% aproximadamente, haciendo su mayor contribución a las mayores longitudes de onda en el ultravioleta de vacío. El continuo que producen las tierras raras no es continuo puro debido a que contiene también un conjunto numerosísimo de líneas ensanchadas, débiles y que no se resuelven, que permanecen añadidas al continuo principal de recombinación. O'Sullivan^{2.14} considera más detalladamente las transiciones atómicas implicadas en los pseudo-continuos de las tierras raras. De todas formas, para fines prácticos, los plasmas producidos por láser de las tierras raras son igualmente fuentes de continuo.

Podemos destacar las siguientes ventajas de los continuos producidos por láser:

1. Facilidad de producción y posicionamiento.
2. Amplia cobertura espectral. Los plasmas de las tierras raras cubren un margen típico de 40-2000 Å.

3. Reproducibilidad. J. Fisher et al^{2,12} han encontrado una variación de un disparo a otro <10%.

4. Alta intensidad. Un plasma de una tierra rara tiene una intensidad típica de $2 \cdot 10^5 \text{ W cm}^{-2} \text{ sr}^{-1} \text{ nm}^{-1}$ a 1200 Å.

El método de las *razones de ramificación* presenta la desventaja de que al ser un método discreto se necesitan un suficiente número de pares de puntos para caracterizar la curva de eficiencia. Este problema es especialmente acusado en el ultravioleta de vacío por no disponer de un gran número de probabilidades de transición fiables. Además, al no tener suficientes datos, la curva de ajuste escogida da un comportamiento global de la función eficiencia, promediando los detalles de la misma.

Por el contrario, el método del continuo permite una caracterización más detallada de la función eficiencia. Haciendo un barrido de la zona espectral que se quiere calibrar utilizando una fuente de continuo (como por ejemplo un plasma de W, Sm) se obtiene el espectro aparente de estos elementos. Sabiendo el espectro absoluto de estas fuentes de continuo se puede establecer la siguiente relación:

$$I_{ap}(\lambda) = \varepsilon_1(\lambda)I_{abs}(\lambda) + \varepsilon_2(\lambda/2)I_{abs}(\lambda/2) + \dots + \varepsilon_n(\lambda/n)I_{abs}(\lambda/n)$$

Donde $\varepsilon_i(\lambda) \rightarrow$ Eficiencia del orden i-ésimo.

Considerando que las contribuciones en segundo y sucesivos órdenes son despreciables, se puede obtener la eficiencia en primer orden.

$$\varepsilon_1(\lambda) \approx \frac{I_{ap}(\lambda)}{I_{abs}(\lambda)} \quad (2.1)$$

B. RESULTADOS OBTENIDOS Y DISCUSIÓN

B1. RAZONES DE RAMIFICACIÓN EMPLEADAS

Oxígeno y nitrógeno ionizados.

La respuesta espectral de nuestro sistema espectrométrico en el margen espectral de 484 a 872 Å ha sido determinada midiendo intensidades de líneas de emisión de oxígeno y nitrógeno ionizado obtenidas de un plasma de material cerámico; alúmina (Al_2O_3) para las líneas de O II y nitruro de boro (BN) para las líneas de N II y N III. En la fig.2.1 se muestra un ejemplo de los espectros obtenidos con el nitruro de boro.

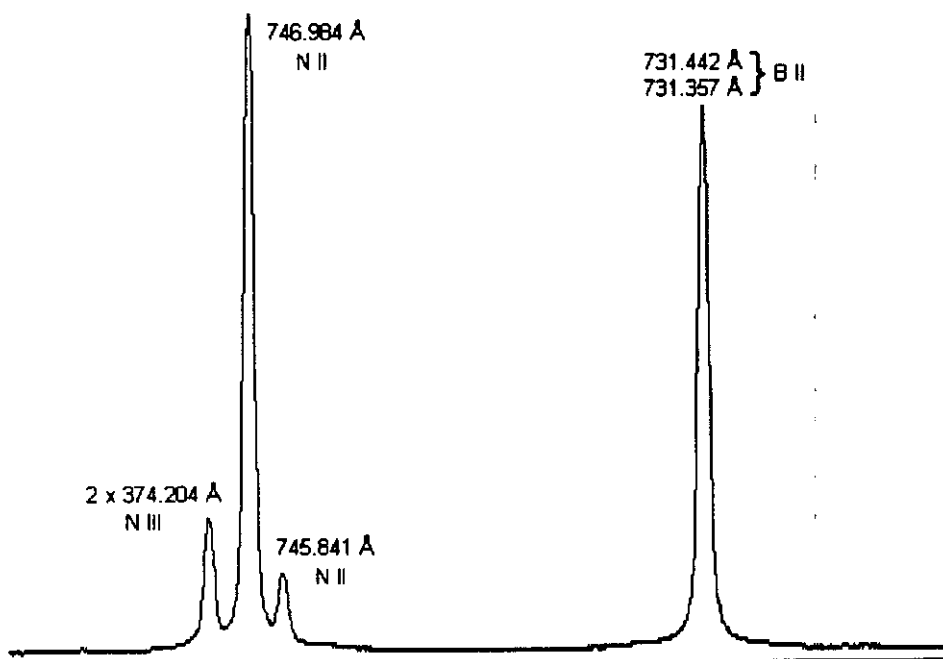


Fig.2.1. Espectro de un plasma de BN. Se pueden apreciar las líneas de 745.841 Å y 746.984 Å de N II empleadas en la calibración.

Las medidas fueron realizadas a baja irradiancia para evitar que se mezclaran con otras líneas de especies más ionizadas. Por ejemplo la línea de 617.051 Å de O II puede verse interferida a alta irradiancia por las líneas de 616.952, 617.036 y 617.005 Å de O IV. En las figs.2.2-3 se muestra un ejemplo de cómo varía el espectro en donde aparece la línea de 617.051 Å de O II en condiciones de baja y alta irradiancia.

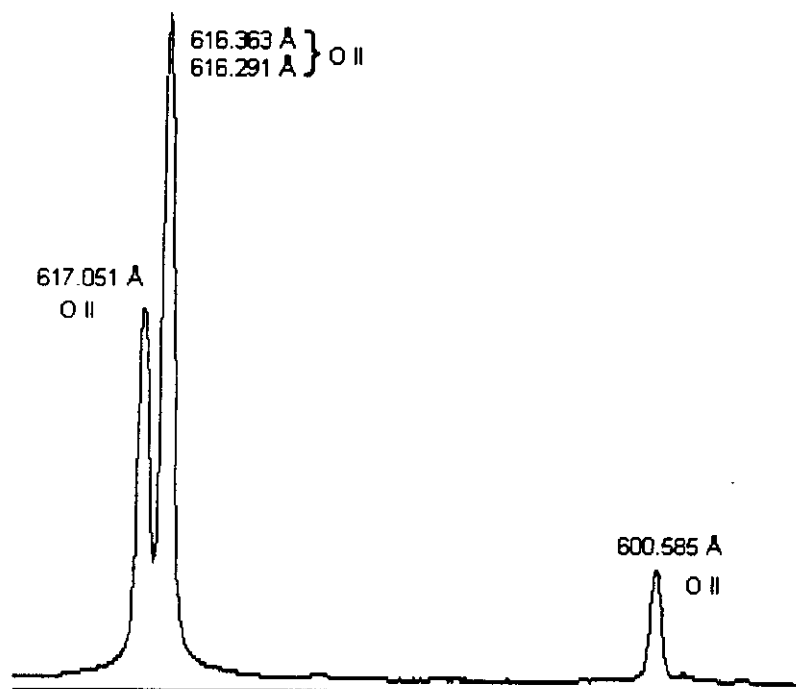


Fig.2.2. Espectro de Al_2O_3 obtenido a baja irradiancia. Se puede apreciar el multiplete de 617 Å de O II usado para la calibración.

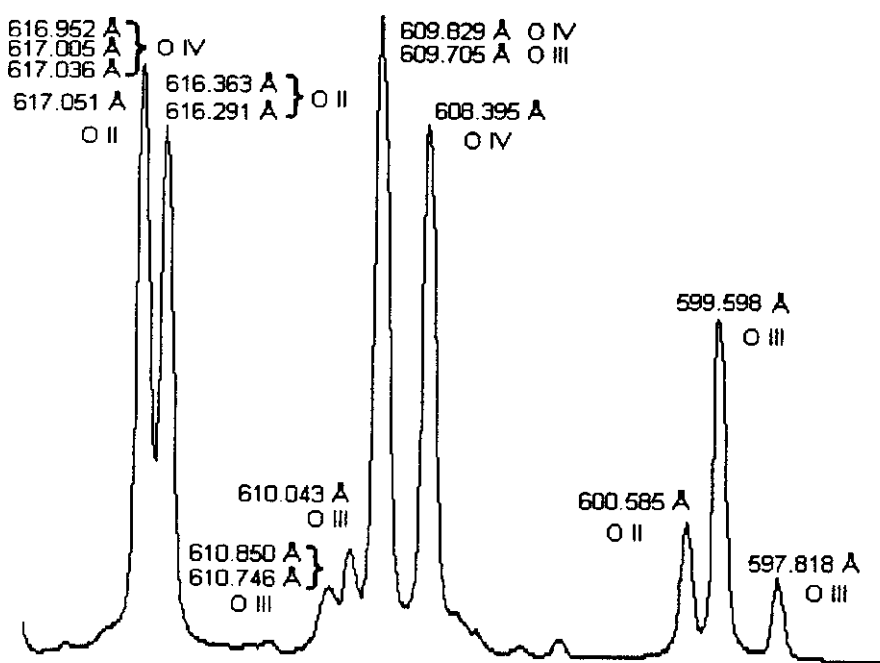


Fig.2.3. Espectro de un plasma de Al_2O_3 obtenido a alta irradiancia en el que aparecen líneas de O III y O IV .

Para las parejas de líneas 483.9/518.1 Å y 538.1/580.8 Å de O II; 660.3/745.8 Å y 747.0/858.4 Å de N II; y 691.3/872.0 Å de N III hemos escogido las razones de probabilidades de transición experimentales dadas por Bastert and Bukow^{2.4}, Hibst and Bukow^{2.15} (tabla 2.1), las cuales fueron determinadas con un espectrómetro calibrado mediante radiación sincrotrón usando la técnica de "beam foil".

Para la razón 616.5/673.2 Å de O II debe tenerse en cuenta que la línea de 616.5 Å puede estar mezclada con las líneas de O IV mencionadas anteriormente, así que se ha usado como razón de probabilidades de transición la dada por Bell y Hibbert^{2.16} (tabla 2.1) que fue obtenida usando cálculos elaborados de interacción de configuraciones. Hay que señalar que el valor experimental de Bukow, 2.38, es el más alto presentado en la tabla 2.1. Con respecto a la razón 525.8/597.8 Å de O III, usada para calibrar por algunos autores, Cunningham^{2.3}, Sato^{2.5}, es necesario considerar que la línea 525.795 Å puede estar mezclada con la 525.9267 Å de O II (transición: $2s^2 2p^2(1S)3s\ ^2S \rightarrow 2s^2 2p^3\ ^2P^o$ Martin, Kaufman and Musgrove^{2.17}). Por lo tanto esta razón no ha sido incluida en el presente trabajo. Tampoco ha sido escogido la razón de 718.5/797.7 Å de O II dada por otros autores ya que posiblemente está mezclada con un 2º orden de 359.223 Å de O III. En nuestro caso esta razón de intensidades ha variado al cambiar las condiciones experimentales.

Carbono, aluminio y azufre ionizados.

La razón de intensidades de las líneas 386.2 Å y 884.5 Å de C III obtenidas en un plasma de polietileno (C₂H₂)_n producido por láser y las probabilidades de transición dadas por Klose y Wiese^{2.18} (tabla 2.1) han sido usadas para extender la calibración del sistema hasta 386 Å.

Un ejemplo de los espectros obtenidos se puede ver en la fig.2.4, donde aparece la línea de 386.2 Å.

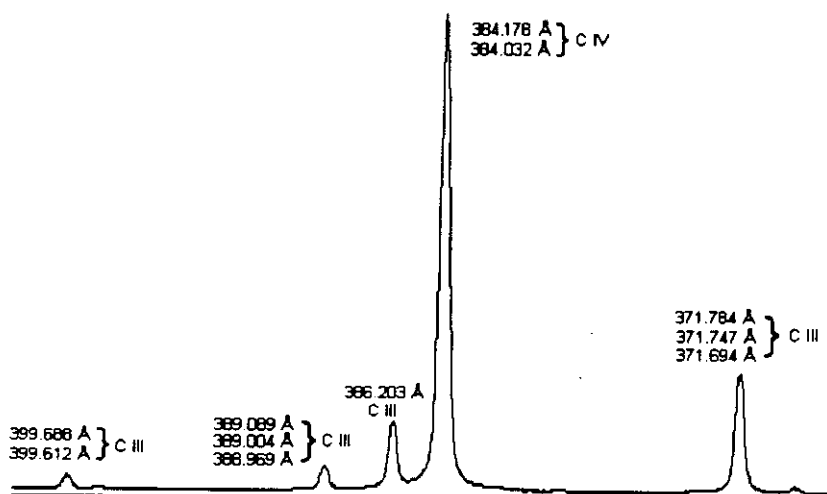


Fig. 2.4. Espectro de un plasma de polietileno.

Las intensidades de líneas de emisión de líneas de S II han sido medidas en un plasma producido por láser de sulfuro de zinc (ZnS). Para la razón 1014/1125 Å de S II hay acuerdo entre los datos publicados de las probabilidades de transición experimentales y teóricas. Hemos usado para la calibración el valor experimental dado por Cunningham^{2,3} (tabla 2.1).

En la fig.2.5 se presenta un ejemplo de los espectros obtenidos utilizados en las medidas.

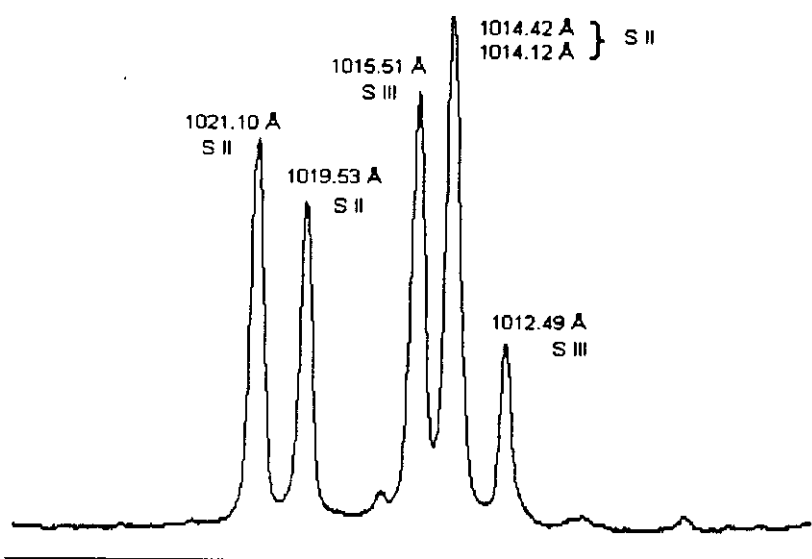


Fig. 2.5. Espectro de un plasma de ZnS en el que se observa el multiplete de 1014 Å empleado para la calibración.

La pareja de líneas de 937.5/1031.1 Å de S II, utilizada por Cunningham^{2,3} en la calibración de su sistema espectrométrico, no ha sido incluida porque existe una gran discrepancia de valores para la probabilidad de transición. Una vez calibrado en eficiencia nuestro espectrómetro, midiendo las intensidades de estas líneas se ha dado un valor para la razón de probabilidad de transición (tabla 3C.1).

Para extender la calibración del sistema a 1337 Å han sido empleadas las líneas de emisión de Al IV y las probabilidades de transición teóricas publicadas por Hibbert et al^{2,19} (tabla 2.1). Las medidas se han llevado a cabo a baja irradiancia del láser para evitar que algunas líneas se mezclaran con órdenes de difracción superiores de líneas de Al VI y Al VII. Un ejemplo de los espectros obtenidos se presenta en la fig.2.6.

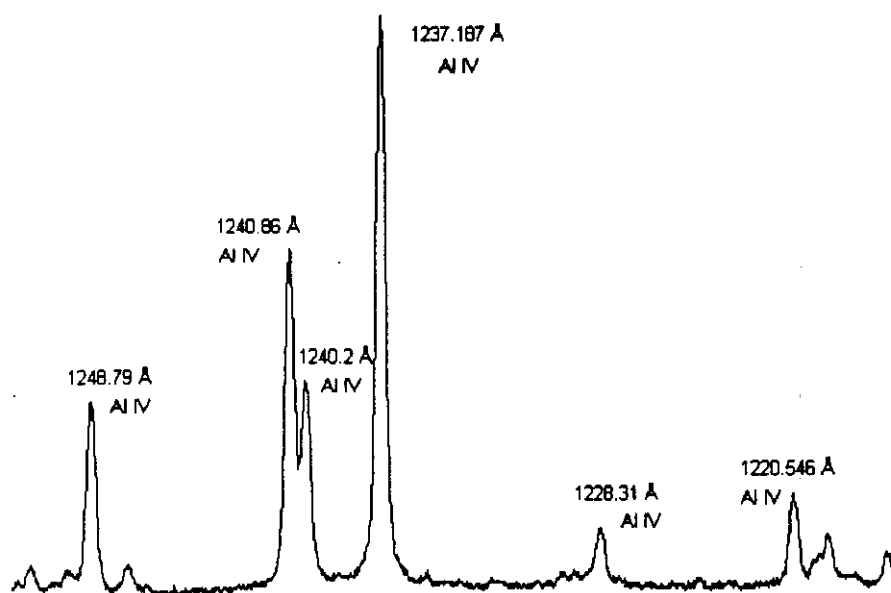


Fig.2.6. Espectro de un plasma de Al en el que se pueden ver las líneas de 1240.86 Å y 1220.55 Å de Al IV usadas para la calibración.

B2. EFICIENCIA RELATIVA

En la tabla 2.1 se muestran las razones de eficiencia obtenidas. El error de estos valores ha sido obtenido del error estadístico de la medidas de intensidad junto con el error de las razones de probabilidades de transición encontradas en la bibliografía.

Ion	λ_i/λ_j (Å)	Nivel Superior	Razón de probabilidades de transición A_i/A_j				Razón de intensidad	Razón de eficiencia
			Experiment.	Ref.	Teoría	Ref.		
C III	$\frac{386.2}{884.5}$	$2s3p\ ^1P_1^o$			9.97 ^a	[2.18]	3.1 ± 0.3	0.3 ± 0.1
					6.71	[2.22]		
					8.38	[2.23]		
					5.30	[2.24]		
					8.59	[2.25]		
O II	$\frac{483.9}{518.1}$	$2s^22p^2(^3P)3d\ ^2P$	1.1 ± 0.14 0.95 ± 0.12^a	[2.3] [2.4]	0.68	[2.16]	0.87 ± 0.09	0.9 ± 0.2
					0.66	[2.26]		
					0.41	[2.27]		
					0.81	[2.28]		
	$\frac{538.1}{580.8}$	$2s2p^4\ ^2P$	2.6 ± 0.36 3.8 ± 0.5^a 4.0 ± 0.6	[2.3] [2.15] [2.37]	3.38	[2.16]	3.1 ± 0.3	0.82 ± 0.19
					3.50	[2.26]		
					3.39	[2.28]		
	$\frac{616.5}{673.2}$	$2s^22p^2(^3P)3s\ ^2P$	5.3 ± 0.37 7.6 ± 0.8	[2.3] [2.38]	6.15 ^a	[2.16]	4.53 ± 0.45	0.74 ± 0.22
					5.46	[2.26]		
					5.56	[2.27]		
N III	$\frac{691.3}{872.0}$	$2s^2(^1S)3p\ ^2P^o$	2.89 ± 0.03^a	[2.15]	2.84	[2.29]	2.8 ± 0.5	0.98 ± 0.2

Tabla 4.1. Razones de probabilidades de transición experimentales y teóricas de las razones de ramificación usadas para la calibración.

El error estimado para las probabilidades de transición teóricas de C III dada por Klose y Wiese^{2,18} es del 10%. Hemos estimado la misma precisión para el resto de las probabilidades de transición teóricas usadas en nuestra calibración.

Tabla 4.1. continuación.

Ion	λ_i/λ_j (Å)	Nivel Superior	Razón de probabilidad de transición A_i/A_j				Razón de intensidad	Razón de eficiencia
			Experiment.	Ref.	Teoría	Ref.		
N II	$\frac{660.3}{745.8}$	$2s2p^3\ ^1P_1^o$	3.0 ± 0.3 3.3 ± 0.4^a 2.57	[2.3] [2.15] [2.39]	2.54 2.55	[2.30] [2.31]	3.23 ± 0.32	0.98 ± 0.22
	$\frac{747.0}{858.4}$	$2s^22p(^2P^o)3s\ ^1P_1^o$	102 ± 17 144 ± 31^a	[2.3] [2.4]	140.3 91.3 148.7 82.5	[2.30] [2.31] [2.32] [2.33]	164 ± 15	1.14 ± 0.34
S II	$\frac{1014.3}{1124.7}$	$3s^23p^2(^3P)4s^2P$	2.72 ± 0.17^a	[2.3]	2.98 2.67 2.35	[2.34] [2.35] [2.35]	3.5 ± 0.2	1.29 ± 0.16
Al IV	$\frac{1125.6}{1337.9}$	$2s^22p^5(^2P^o)3d\ ^3P_2^o$			3.559 ^a 3.69	[2.19] [2.36]	20 ± 1	5.6 ± 1.4
	$\frac{1198.5}{1272.8}$	$2s^22p^5(^2P^o)3d\ ^1F_3^o$			0.20 ^a 0.21	[2.19] [2.36]	0.33 ± 0.02	1.65 ± 0.41
	$\frac{1220.5}{1240.2}$	$2s^22p^5(^2P^o)3d\ ^3F_2^o$			0.395 ^a 0.395	[2.19] [2.36]	0.42 ± 0.02	1.1 ± 0.3

^a Razones de probabilidades de transición usadas para la calibración.

Para reconstruir la curva de eficiencia a partir de los datos de las razones, hemos utilizado como primera aproximación un método de interpolación-extrapolación lineal usado por Sato et al^{2.5}. Se ha elaborado el programa SATO (Apénd.A3) para la reconstrucción de la función eficiencia por interpolación lineal. En la fig.2.7 se muestra la gráfica obtenida, observándose que existe un máximo en $\approx 750 \text{ \AA}$ decayendo rápidamente a ambos lados del mismo.

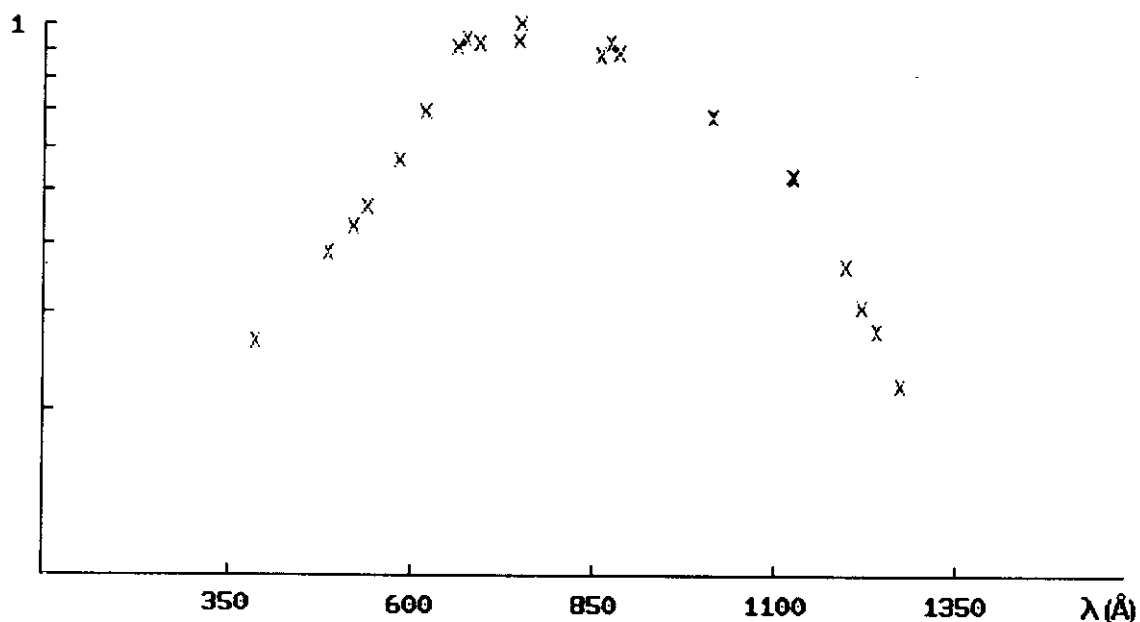


Fig. 2.7. Curva de eficiencia obtenida por interpolación-extrapolación lineal.

A partir de este resultado hemos postulado la exponencial de un polinomio cúbico como forma funcional de ajuste por su conveniencia matemática. El grado 3 del polinomio permite cierta flexibilidad en el ajuste pues un grado menos fuerza la simetría de la curva en torno al máximo de eficiencia. De todas maneras la asimetría de la curva ajustada es leve ($a_1 \approx 0$). Se ha elaborado el programa RATIO (Apénd.A2) para realizar un ajuste por mínimos cuadrados generalizados de las razones experimentales a la exponencial de una polinomio cúbico.

Por tanto, los valores de las razones de eficiencia relativa han sido ajustados a la función:

$$\varepsilon_r(\lambda) = k \exp(a_1 \lambda^3 + a_2 \lambda^2 + a_3 \lambda)$$

según el método descrito en el Apénd.A2, resultando los siguientes valores para los parámetros de ajuste:

$$a_1 = (-1.477 \pm 2.650) 10^{-9} \text{ \AA}^{-3} \quad a_2 = (-4.335 \pm 6.727) 10^{-7} \text{ \AA}^{-2}$$

$$a_3 = (9.770 \pm 5.144) 10^{-3} \text{ \AA}^{-1} \quad k = 0.0138$$

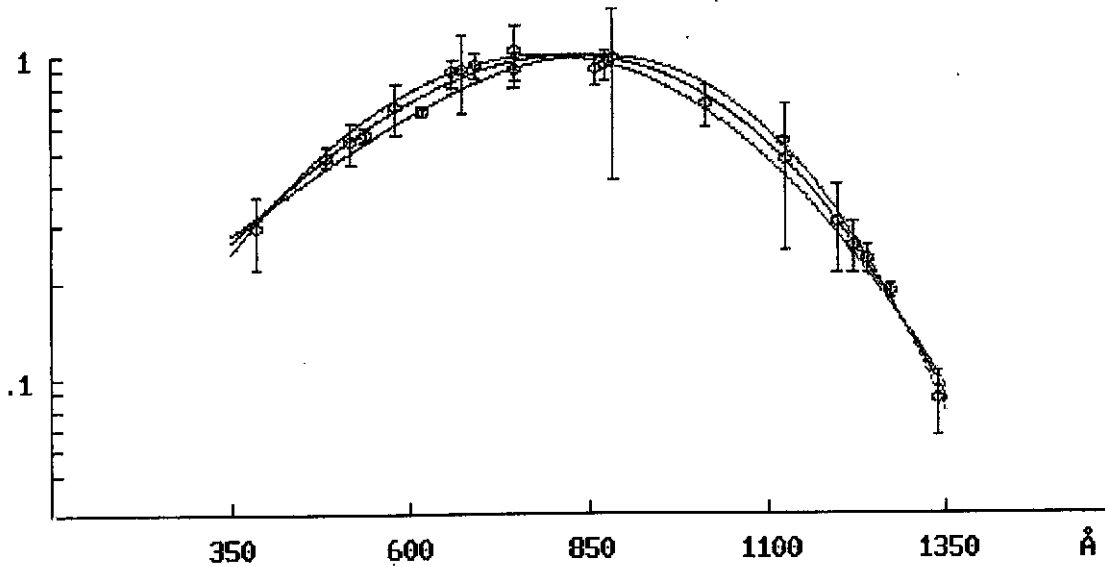


Fig. 2.8. Eficiencia obtenida mediante el ajuste por mínimos cuadrados de los valores experimentales de las razones de ramificación de la eficiencia, a una exponencial de un polinomio cúbico.

La curva de eficiencia relativa del sistema monocromador-detector obtenida con estos parámetros se presenta en la fig.2.8 y como se verá más adelante hay un buen acuerdo con la eficiencia relativa obtenida con un plasma de wolframio producido por láser (fig.2.7).

Hay que observar que aunque los errores en los parámetros son muy grandes, la gráfica de las curvas con los parámetros por exceso y defecto (*gráficas de trazo azul* fig.2.8) están próximas en el margen espectral que se ha ajustado (386-1337 Å) separándose entre sí fuera del mismo. Es decir, los coeficientes a_i no son medidas experimentales con un error, sino parámetros de ajuste cuyo error hay que cuantificar gráficamente.

En la fig.2.8 también se han representado los puntos auxiliares, con su correspondiente error, de las razones experimentales asociadas a la curva de ajuste, tal y como se ha explicado en el Apénd.A2.

También merece observar que para que el exponente de la exponencial de la curva de ajuste sea adimensional es necesario que los parámetros a_i tengan dimensiones. La constante de normalización k es adimensional.

El máximo de la eficiencia se encuentra en:

$$\lambda_{ef.máx} = 799.93 \pm 33.11 \text{ \AA}$$

El error en este valor se ha calculado hallando el máximo de las curvas de ajuste con los parámetros por defecto y por exceso.

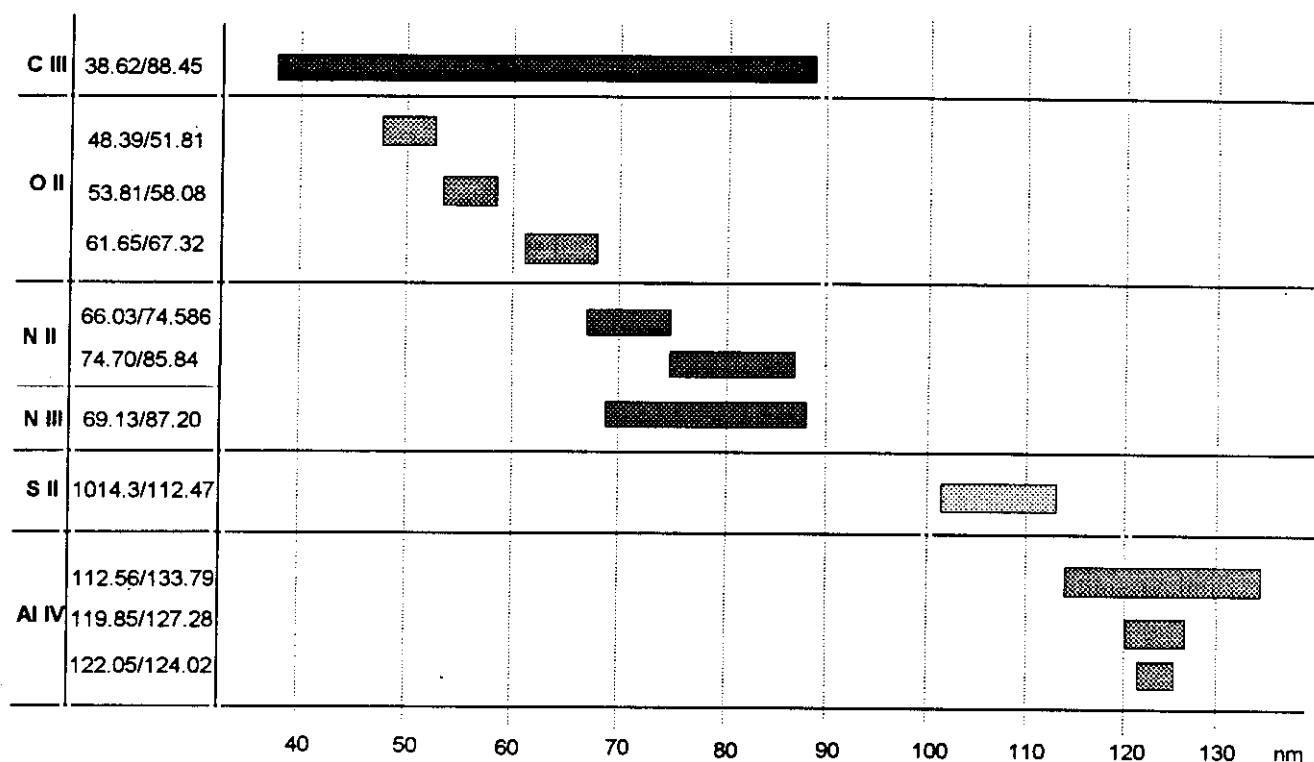
Para cuantificar el grado de ajuste de la curva hallada con respecto a los datos de las razones de eficiencia se han calculado los coeficientes de determinación y porcentual definidos en el *Apénd.A2*.

$$R = 0.969907 \quad R_{\%} = 0.995044$$

También se ha calculado el índice de condicionamiento (*Apénd.A2*) para saber si nuestro ajuste tenía problemas de multicolinealidad, obteniéndose un valor que indica multicolinealidad baja.

$$I_c = 6.60533$$

En la cuadro 2.1 se muestra el margen de longitudes de onda que cubre cada razón de ramificación. Es necesario que haya un número suficiente de razones para que nuestro ajuste sea estadísticamente razonable. También es necesario que los márgenes espectrales que cubre cada razón de ramificación se solapen y no queden aislados unos de otros, ya que producirían una gran libertad en el ajuste. En nuestro caso se observa un salto entre 900 y 1000 Å (cuadro 2.1). Por tanto, debido a que tanto el requisito de solapamiento como el de número suficiente de razones, no se cumplen satisfactoriamente, se ha verificado la curva de ajuste utilizando el espectro continuo de un plasma de wolframio producido por láser.



Cuadro 2.1. Margen espectral que cubre cada una de las razones de ramificación usadas en la calibración.

El límite superior en longitud de onda de la eficiencia de nuestro sistema espectrométrico esencialmente es debido al rápido decrecimiento de la eficiencia de las placas microcanales sin recubrimiento (fig.2.9) de las que consta nuestro detector. El límite inferior está principalmente determinado por la baja reflectividad del recubrimiento de platino de la red de difracción por debajo de 350 Å. En la fig.2.10 se muestra la reflectividad del Pt en el margen espectral de ultravioleta de vacío Ref^{2.20}.

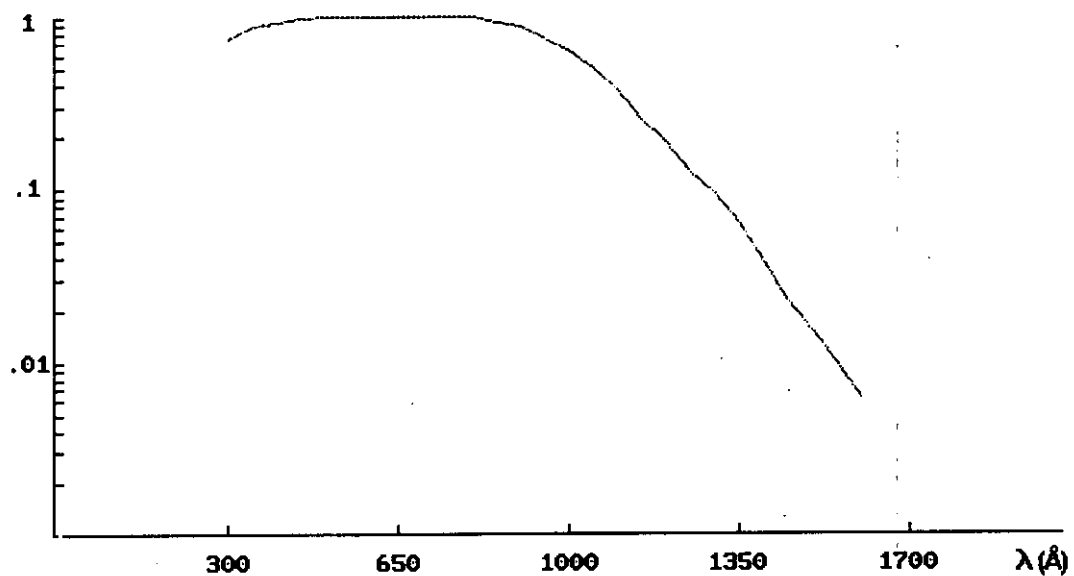


Fig.2.9. Eficiencia relativa de las placas microcanales sin recubrimiento utilizadas en nuestro sistema detector.



Fig.2.10. Reflectividad del $Pt^{2.20}$ en el margen espectral 300-1600 Å.

B3. EMISIÓN CONTINUA

Los plasmas de wolframio producidos por láser fueron investigados como fuente estándar de transferencia radiométrica, para el ultravioleta de vacío y los rayos X blandos, por Fischer et al^{2.21}. Como han señalado estos autores para energías del impulso del láser entre 100 mJ y 800 mJ, no se han encontrado variaciones significativas en la distribución espectral relativa del plasma. Estos mismos autores presentan el espectro absoluto del wolframio en el margen espectral 0.5-1100 Å, del cual sólo se detalla el margen espectral de interés en la fig.2.11.

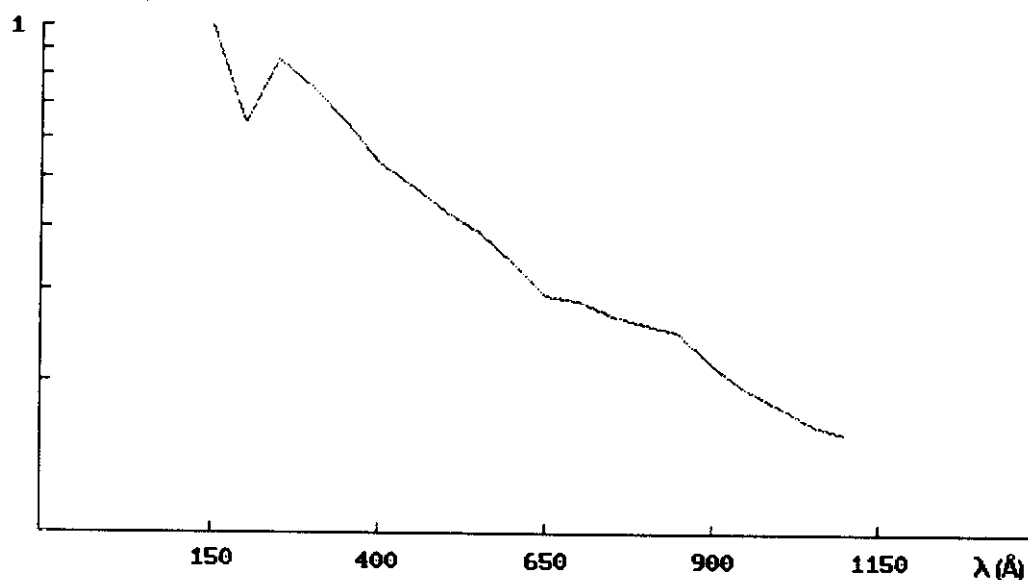


Fig.2.11. Espectro del wolframio dado por Fischer et al^{2.12}, normalizado a la unidad.

Hemos obtenido el espectro continuo de un plasma de wolframio, samario y uranio producido por láser en el margen espectral desde 300 a 1100 Å para emplearlo en la calibración del sistema (fig.2.12). Tanto en el caso del wolframio como en el del samario y el uranio, los espectros muestran características similares en el margen espectral estudiado.

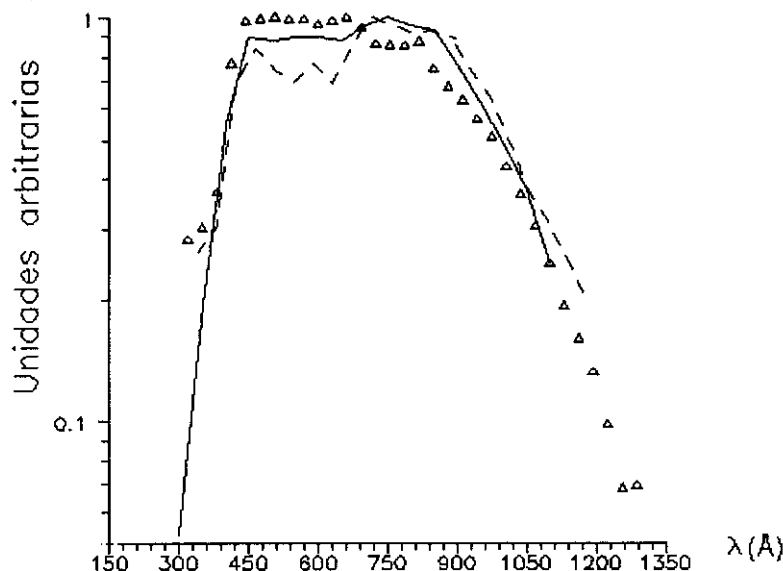


Fig. 2.12. Espectros continuos de emisión de plasmas de: -- samario, Δ uranio y --- wolframio.

Se ha comprobado que los segundos y sucesivos órdenes de difracción en nuestro sistema tienen una contribución despreciable a la intensidad aparente observada. Como se ha descrito anteriormente, conocido el espectro absoluto del wolframio entre 300 y 1100 Å podemos deducir la eficiencia en primer orden aplicando (ec. 2.1), a partir del espectro del wolframio obtenido con nuestro sistema. En la fig. 2.13 se puede ver la eficiencia relativa obtenida por este método. En la fig. 2.14 se puede observar la comparación entre las curvas de calibración obtenidas por el método del continuo y por el método de las razones de ramificación, apreciándose un notable acuerdo entre ambos resultados.

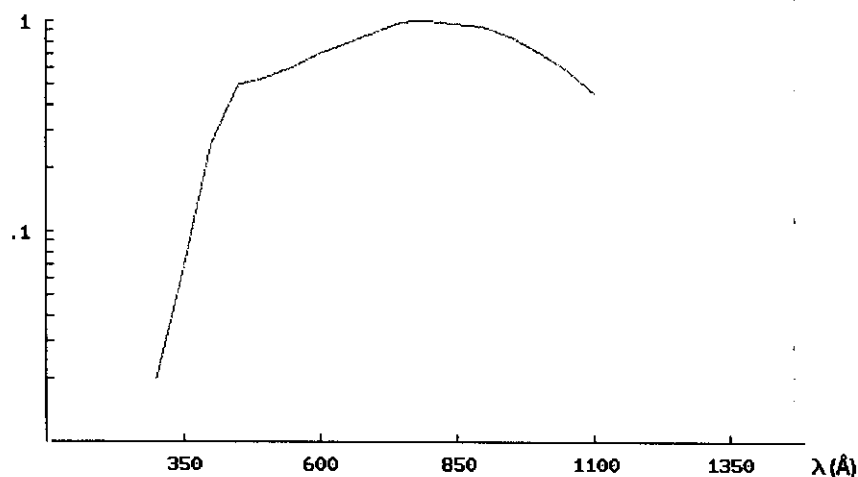


Fig. 2.13. Curva de eficiencia obtenida con una fuente de continuo de un plasma de wolframio producido por láser.

B4. COMPATIBILIDAD CONTINUO-RAZONES DE RAMIFICACIÓN

Como se observa gráficamente en la fig.2.14 la compatibilidad entre la función eficiencia obtenida mediante una fuente de continuo y la obtenida mediante las razones de ramificación es bastante buena. El continuo se ha empleado para ratificar el resultado obtenido por las razones de ramificación. Ello es necesario porque además de no tener suficientes razones para hacer un buen ajuste; también, tal como se observa en el cuadro 2.1, hay un margen espectral que las razones de ramificación no cubren (900-1000 Å). Este resultado por tanto corrobora como curva de ajuste la exponencial de un polinomio cúbico, pues esta curva se solapa con el continuo notablemente entre 900-1000 Å.

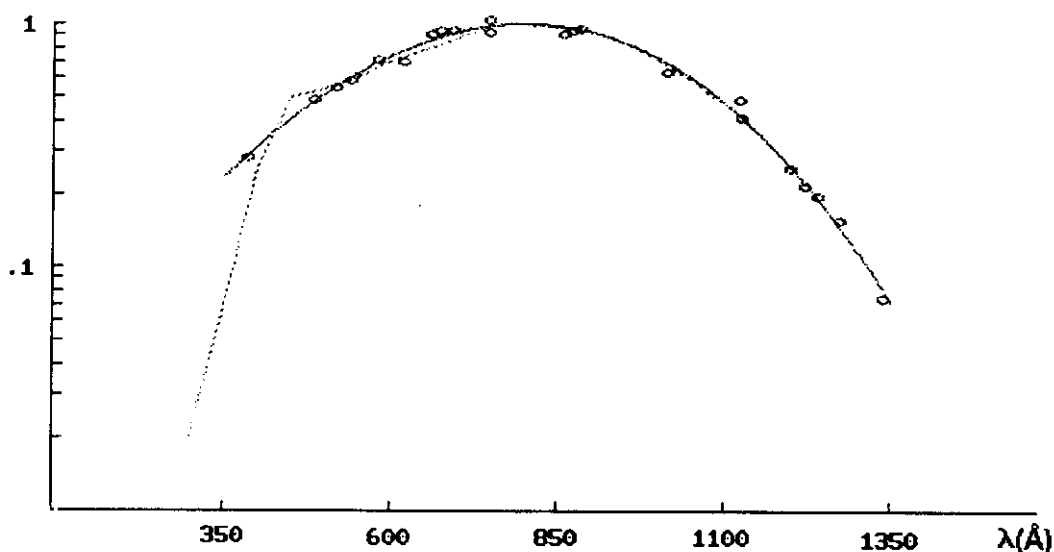


Fig.2.14. Comparación de la eficiencia obtenida por el método del continuo (trazo discontinuo) con la obtenida con las razones de ramificación (trazo continuo).

El grado de ajuste entre las razones de eficiencia usadas para la calibración y la función eficiencia obtenida por este método aparece en la fig.2.15. Hay que observar que la función eficiencia del continuo solamente llega hasta 1100 Å, por tanto la razón de S II y las Al IV quedan fuera de dicho margen, y no se han representado.

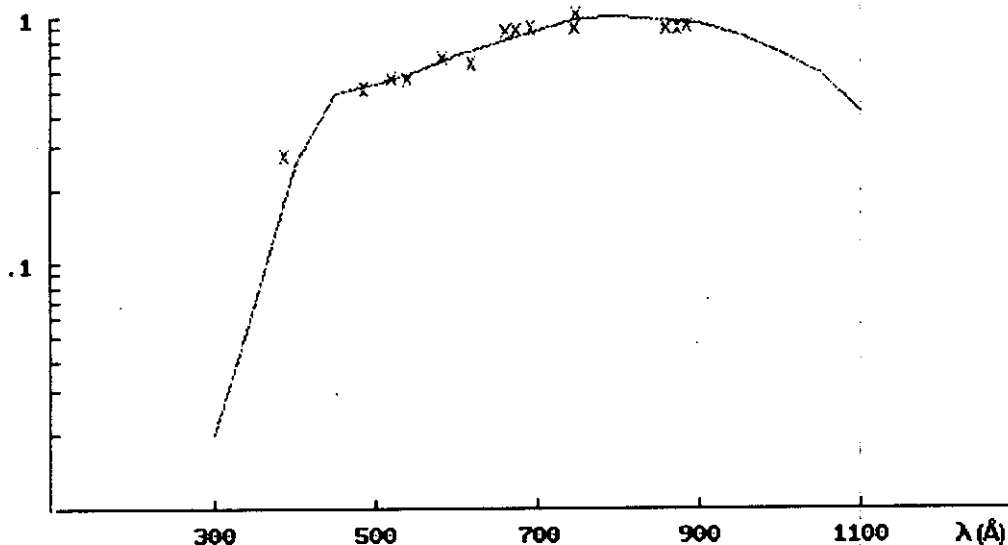


Fig.2.15. Función eficiencia obtenida de un espectro continuo de wolframio, sobre la que están representadas las razones ramificación en eficiencia usadas para la calibración.

Se ha elaborado el programa COMPAT (Apénd.A1) que representa la poligonal experimental para la eficiencia obtenida a partir de la medida de la intensidad aparente de un fuente de continuo, en nuestro caso un plasma de tungsteno en el margen espectral 350-1100 Å. Sobre esta poligonal y siguiendo el método explicado en (Apénd.A2), se dibujan unas parejas de puntos auxiliares que representan las medidas de las razones de ramificación de la eficiencia. Tomando las distancias de la poligonal del continuo a dichos puntos auxiliares podemos estimar el grado de compatibilidad de ambos métodos hallando el coeficiente de determinación.

$$r^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{2n} (\epsilon_{aux}(\lambda_i) - \epsilon_{pol}(\lambda_i))^2}{\sum_{i=1}^{2n} (\epsilon_{aux}(\lambda_i) - \bar{\epsilon}_{aux})^2} \quad (2.2)$$

$$\bar{\epsilon}_{aux} = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{2n} \epsilon_{aux}(\lambda_i) \quad n = n^\circ \text{ razones}$$

En nuestro caso el coeficiente de determinación dado en (2.2) es bastante aceptable.

$$r = 0.9848$$

REFERENCIAS CAPÍTULO 2

- 2.1 W. G. Griffin and R. W. P. McWhirter, *Proc. Conf. Optical Instruments and Techniques*, pp 14-21, Wiley, NY (1963)
- 2.2 E. Hinnov and F. W. Hofmann, *J.O.S.A.* **53**, 1259 (1963).
- 2.3 F. Yang and A. J. Cunningham, *J.Q.S.R.T.* **49**, 53 (1993).
- 2.4 A. Bastert, H. H. Bukow and H. von Buttlar, *Appl. Opt.* **31**, 6597 (1992).
- 2.5 K. Sato, M. Otsuka and M. Mimura, *Applied Optics*, **23**, 3336 (1984).
- 2.6 B. H. Armatrong, *J.Q.S.R.T.* **7**, 61 (1967).
- 2.7 J. F. Kielpopt, *J.O.S.A.* **63**, 987 (1973).
- 2.8 D. Peña, "*Estadística. Modelos y Métodos. 2. Modelos lineales y series temporales*". pp. 382, 511. Alianza Ed. (1989).
- 2.9 D. Peña, "*Estadística. Modelos y Métodos. 2. Modelos lineales y series temporales*". p.387. Alianza Ed. (1989).
- 2.10 G. O'Sullivan, P. K. Carroll, T. J. McIlrath and M. L. Ginter, *Appl. Opt.* **20**, 3043 (1981).
- 2.11 G. O'Sullivan, J. R. Roberts, W. R. Ott, J. M. Bridges, T. L. Pittman, M. L. Ginter, *Opt. Letters*, **7**, 31 (1982).
- 2.12 J. Fischer, M. Kühne and B. Wende, *Appl. Opt.* **23**, 4252 (1984).
- 2.13 P. Nicolosi, E. Jannitti and G. Tondello, *Appl. Phys.* **B26**, 117 (1981).
- 2.14 G. O'Sullivan, *J. Phys.* **B16**, 3291 (1983).
- 2.15 R. Hibst and H.H.Bukow, *Nucl. Instr. and Meth. B* **31**, 284 (1988).

- 2.16 K. L. Bell, A. Hibbert, R. P. Stafford and B.M. McLaughlin, *Physica Scripta* **50**, 343 (1994).
- 2.17 W. C. Martin, V. Kaufman and A. Musgrove, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **22**, 1179 (1993).
- 2.18 J. Z. Klose and W. L. Wiese, *J.Q.S.R.T.* **42**, 337 (1989).
- 2.19 A. Hibbert, M. Le Dourneuf and M. Mohan, *At. Data and Nucl. Data Tables* **53**, 23 (1993).
- 2.20 Max Planck Symposium on "Calibration Methods in the U.V. and X-Ray Regions of the Spectrum" (1968).
- 2.21 J. Fischer, M. Kühne and B. Wende, *Metrologia* **23**, 179 (1986/87).
- 2.22 N. Allard, M. C. Artru, T. Lanz and M. Le Dourneuf, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **91**, 399 (1991).
- 2.23 B. C. Fawcett, *At. Data and Nucl. Data Tables* **30**, 423 (1984).
- 2.24 A. K. Bhatia and S. O. Kastner, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **79**, 139 (1992).
- 2.25 R. M. Nasser, Y. P. Varshni, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **60**, 325 (1985).
- 2.26 K. L. Bell, A. Hibbert, B. M. McLaughlin and K. Higgins, *J. Phys. B* **24**, 2665 (1991).
- 2.27 S. R. Becker and Butler, *Astron. Astrophys.* **201**, 232 (1988).
- 2.28 Y. K. Ho and R. J. W. Henry, *J.Q.S.R.T.* **31**, 57 (1984).
- 2.29 R. P. Stafford, A. Hibbert and K.L. Bell, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **260**, L11 (1993).
- 2.30 K. L. Bell, A. Hibbert and R. P. Stafford, *Phys. Scripta* **52**, 240 (1995).

- 2.31 D. G. Ellis, *Phys. Rev. A* **47**, 161 (1993).
- 2.32 K. L. Bell, C. A. Ramsbottom and A. Hibbert, *J. Phys. B* **25**, 1735 (1992).
- 2.33 D. Luo and A. K. Pradhan, *J. Phys. B* **22**, 3377 (1989).
- 2.34 P. C. Ojha and A. Hibbert, *J. Phys. B* **22**, 1153 (1989).
- 2.35 Y. K. Ho and R. J. W. Henry, *Physica Scripta* **35**, 831 (1987).
- 2.36 B. C. Fawcett, *Physica Scripta* **30**, 326 (1984).
- 2.37 H. J. Flaig, K. H. Schartner, E. Träbert and P. H. Heckmann, *Physica Scripta* **31**, 255 (1985).
- 2.38 N. Allard, M. C. Artru, T. Lanz and M. Le Dourneuf, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **84**, 563 (1990).
- 2.39 L. J. Ryan, L. A. Rayburn and A. J. Cunningham, *J.Q.S.R.T.* **42**, 295 (1989).

CAPÍTULO 3

DETERMINACIÓN DE PROBABILIDADES DE TRANSICIÓN EN ÁTOMOS IONIZADOS

A. MÉTODOS PARA LA DETERMINACIÓN DE PROBABILIDADES DE TRANSICIÓN

A1. MÉTODO DE LA REGLA DE LA SUMA

La probabilidad de emisión espontánea entre dos niveles atómicos viene dada por la expresión, Thorne^{3A.1}.

$$g_{J'} A_{JJ'} = \frac{2.026 \times 10^{18}}{\lambda^3} S_{JJ'} \quad (3.1)$$

$S_{JJ'}$ Fuerza de línea en unidades atómicas ($a_0^2 e^2$)

$g_{J'} = 2J' + 1$ Peso estadístico del nivel excitado

λ en Å $A_{JJ'}$ en s^{-1}

Donde la fuerza de línea en acoplamiento LS viene dada por la expresión, Cowan^{3A.2}.

$$S_{JJ'} = (2J+1)(2J'+1)(2L+1)(2L'+1) \left\{ \begin{matrix} L & J & S \\ J' & L' & 1 \end{matrix} \right\}^2 \left\{ \begin{matrix} l & L & L_c \\ L' & l' & 1 \end{matrix} \right\}^2 |l_{máx}| \rho_{ll'}^2 \quad (3.2)$$

Teniéndose que cumplir las siguientes reglas de selección:

$$\Delta J = 0, \pm 1, 0 \rightarrow 0$$

$$\Delta S = 0 \quad \Delta l = \pm 1$$

Donde la parte radial viene dada en aproximación de longitud, por la expresión:

$$\rho_{ll'} = \int_0^\infty P_{nl}(r) r P_{n'l'}(r) dr \quad (3.3)$$

Siendo $P_{nl}(r)$ las funciones de onda radiales que cumplen la ecuación radial de Schrödinger:

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) \right) P_{nl}(r) = E_{nl} P_{nl}(r) \quad (3.4)$$

Sumando sobre (3.2) obtenemos la regla de suma para las fuerza de línea:

$$\sum_{L'J'} S_{JJ'} = \frac{2J+1}{2I+1} |l_{m\acute{a}x}| \rho_{II'}^2 \quad (3.5)$$

Esta propiedad de suma para fuerza de línea sale igual partiendo del acoplamiento jj , jk o intermedio. Es independiente del acoplo. Por tanto la suma de fuerzas de línea es proporcional al peso estadístico $2J+1$.

Sabiendo que la intensidad de una línea espectral es proporcional a la población del nivel superior y a la probabilidad de transición, $I_{ij} \propto N_i A_{ij}$, podemos expresar según (ec.3.1) la fuerza de línea como:

$$S_{JJ'} = \frac{2J'+1}{2.026 \times 10^{18}} \lambda_{JJ'}^3 A_{JJ'} = k(2J'+1) \lambda_{JJ'}^3 I_{JJ'}$$

Y utilizando la regla de la suma (3.5):

$$\sum_{L'J'} S_{JJ'} = \frac{2J+1}{2I+1} |l_{m\acute{a}x}| \rho_{II'}^2 = k \sum_{L'J'} (2J'+1) \lambda_{JJ'}^3 I_{JJ'}$$

Podemos eliminar la constante de proporcionalidad k en estas dos ecuaciones y despejar la probabilidad de transición, resultando:

$$A_{JJ'} = 2.026 \cdot 10^{18} \frac{2J+1}{2I+1} |l_{m\acute{a}x}| \rho_{II'}^2 \frac{I_{JJ'}}{\sum_{J'} (2J'+1) \lambda_{JJ'}^3 I_{JJ'}} \quad (3.6)$$

Aproximación de Hartree-Fock

El procedimiento más preciso para determinar el potencial central de los átomos es el método del campo autoconsistente. El principio del método es conceptualmente muy sencillo, aunque su aplicación sea casi siempre laboriosa. Se trata de determinar el potencial de la ecuación radial de Schrödinger (3.4) que satisfacen los orbitales de un átomo de manera tal que el potencial producido por la distribución electrostática de la carga de los electrones que se deduce de los orbitales hallados, coincida precisamente con el potencial utilizado para calcular los orbitales. Se trata pues de buscar una consistencia entre el potencial que permite calcular los orbitales y el que se puede evaluar a partir de ellos. Tal consistencia no puede conseguirse con un único cálculo y hace falta recurrir a un proceso iterativo. A partir de un potencial aproximado es preciso resolver la ecuación de Schrödinger para obtener los orbitales y con ellos calcular un nuevo potencial e iniciar un nuevo cálculo.

Para el cálculo de las partes radiales (ec.3.3) según Hartree-Fock se ha recurrido al código de Cowan^{3A.3}

A2. MÉTODO DE LA VIDA MEDIA

Uno de los métodos empleados para determinar probabilidades de transición ha sido llevado a cabo a partir de las medidas de las intensidades de todas las líneas que parten de un mismo nivel superior, siendo conocida la vida media del mismo.

La vida media del nivel i viene dada por:

$$\tau_i = \frac{1}{\sum_j A_{ij}}$$

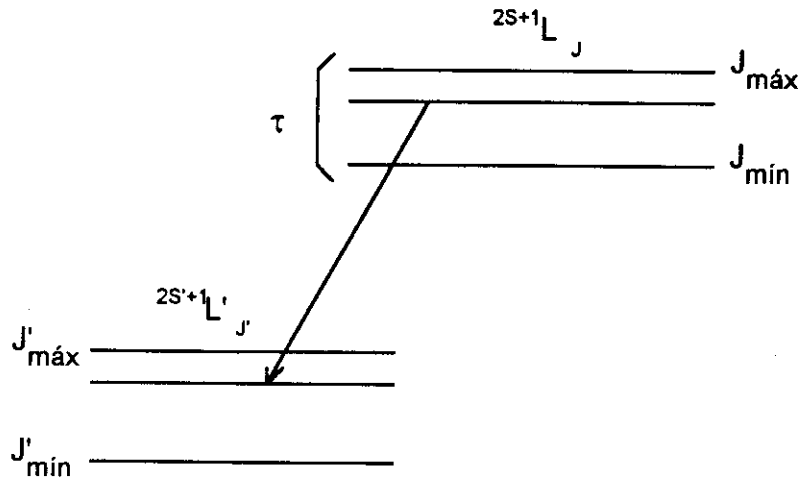
Recordamos que la intensidad de una línea espectral es proporcional a la probabilidad de transición y a la población de dicho nivel (ec.1.20). Sumando en esta ecuación todas las probabilidades de transición que parten del mismo nivel superior i :

$$\left. \begin{aligned} I_{ij} &= kN_i A_{ij} \\ \sum_j I_{ij} &= kN_i \sum_j A_{ij} = kN_i \frac{1}{\tau_i} \end{aligned} \right\} \Rightarrow A_{ij} = \frac{I_{ij}}{\tau_i \sum_j I_{ij}} \quad (3.7)$$

Por tanto, conociendo la vida media del nivel superior y determinando experimentalmente las intensidades de todas las transiciones que tiene dicho nivel superior, podemos evaluar la probabilidad de transición.

Si conocemos la vida media de todo un conjunto de niveles con distinto J entonces tenemos que deducir una nueva ecuación que nos permita resolver el siguiente sistema de ecuaciones lineales.

Supongamos que el término $^{2S+1}L_J$ solamente tiene transiciones al término $^{2S'+1}L'_J$. Sabiendo que la población es proporcional al peso estadístico: $N_J = k(2J+1)$ podemos escribir una serie de ecuaciones.



$$I_{JJ'} = k(2J+1) A_{JJ'} \quad (3.8)$$

Sumando a todos los niveles inferiores J' .

$$\sum_{J'} I_{JJ'} = k(2J+1) \sum_{J'} A_{JJ'} = k(2J+1) \frac{1}{\tau_J}$$

Dividiendo estas dos últimas ecuaciones:

$$\frac{1}{\tau_J} = A_{JJ'} \frac{\sum_{J'} I_{JJ'}}{I_{JJ'}} \quad (3.9)$$

Pero si sólo contamos con la vida media del todo el término y no de cada subnivel J , lo que podemos hacer es considerar que la media armónica de las vidas medias de cada subnivel J es la vida media de todo el término.

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{n^{\circ} \text{ niveles } J} \sum_J \frac{1}{\tau_J}$$

$$n^{\circ} \text{ niveles } J = J_{\text{máx}} - J_{\text{mín}} + 1 = L + S - |L - S| + 1$$

De tal forma que sumando sobre (3.9) obtenemos la siguiente ecuación.

$$\frac{n^{\circ} \text{ niveles } J}{\tau} = \sum_J A_{JJ'} \frac{\sum_{J'} I_{JJ'}}{I_{JJ'}} \quad (3.10)$$

Con las ecuaciones (3.8) y la (3.10) tenemos un sistema de ecuaciones lineal en donde las incógnitas son las probabilidades de transición $A_{JJ'}$ y los coeficientes vienen dados por las intensidades relativas de las líneas.

A3. MÉTODO DE LA TEMPERATURA

Este método permite calcular la probabilidad de una transición atómica conocida la temperatura a la que se encuentra el plasma y tomando como referencia una línea patrón de probabilidad de transición bien conocida. Para poder considerar una temperatura, ésta debe estar definida por la energía cinética de los electrones, dándose las condiciones de equilibrio termodinámico local, en la que los niveles atómicos se pueblan según la distribución de Boltzmann. También hemos de suponer que estamos en condiciones de emisión pura, no produciéndose fenómenos de autoabsorción, con lo que el plasma ha de ser ópticamente delgado. En estas condiciones podemos considerar que la intensidad de una línea espectral es proporcional a la población del nivel superior y a la probabilidad de transición (ec.1.20).

$$I_{ij} \propto N_i A_{ij}$$

Cumplíendose la distribución de Boltzmann (ec.1.15):

$$\frac{N_j}{N} = \frac{g_j e^{-E_j/kT}}{\sum_j g_j e^{-E_j/kT}} = \frac{g_j e^{-E_j/kT}}{Z(T)}$$

Entonces la razón entre dos líneas espectrales viene dada por la expresión:

$$\frac{I_1}{I_2} = \frac{A_1 N_1}{A_2 N_2} = \frac{A_1 g_1}{A_2 g_2} e^{-\frac{E_1 - E_2}{kT}} \quad (3.11)$$

$g_i = 2J_i + 1$ Degeneración del nivel i

Por tanto, determinando la intensidad de ambas líneas, sabiendo la temperatura y conociendo la probabilidad de transición de una de ellas (línea patrón), podemos evaluar la probabilidad de transición de la otra.

B. ALUMINIO VI y VII

Con el sistema experimental de ultravioleta de vacío descrito anteriormente (cap.1A) se han obtenido espectros de emisión de un plasma de aluminio haciendo incidir un haz láser de Nd:YAG sobre una muestra de aluminio de 99.99% de pureza. El margen espectral en dichos espectros se encuentra entre 240 Å y 1700 Å en los que se ha conseguido hasta octavos órdenes de difracción en las líneas de 160 Å del Al IV. La observación de un elevado número de órdenes dificulta, por una lado, la identificación por la mezcla de líneas espectrales, pero por otro lado, permite resolver multipletes que en primer orden de difracción no se resuelven. Se han detectado líneas de aluminio en diferentes grados de ionización, desde Al II al Al X. La mayor o menor ionización observada depende fundamentalmente de dos cosas:

1. La parte de la pluma que esté iluminando la rendija de entrada del monocromador. Si estamos cogiendo una zona del plasma muy cercana a la superficie de la muestra observaremos especies muy ionizadas, y al irnos alejando los iones habrán tenido tiempo de recombinarse, teniéndose átomos con menor grado de ionización.
2. La irradiancia (W/cm^2) del haz láser sobre la muestra, que a su vez depende de lo focalizado que esté el haz sobre la muestra y de la energía del haz incidente, que se controla con la tensión que se aplica a las lámparas de flash del láser.

Para la identificación de las líneas espectrales y la determinación de los niveles de energía se han empleado las tablas de Kelly^{3B.1} y Kaufmann^{3B.2}.

B1. DIAGRAMAS DE GROTRIAN

Hemos determinado las probabilidades de transición de tres multipletes:

1. $2s2p^5\ ^3P^o \rightarrow 2s^2\ 2p^4\ ^3P$ del Al VI.
2. $2s2p^4\ ^4P \rightarrow 2s^2\ 2p^3\ ^4S_{3/2}$ del Al VII.
3. $2s2p^4\ ^2D \rightarrow 2s^2\ 2p^3\ ^2D^o$ del Al VII

De las cuales se presentan sus correspondientes diagramas de Grotrian (figs.3B.1-3).

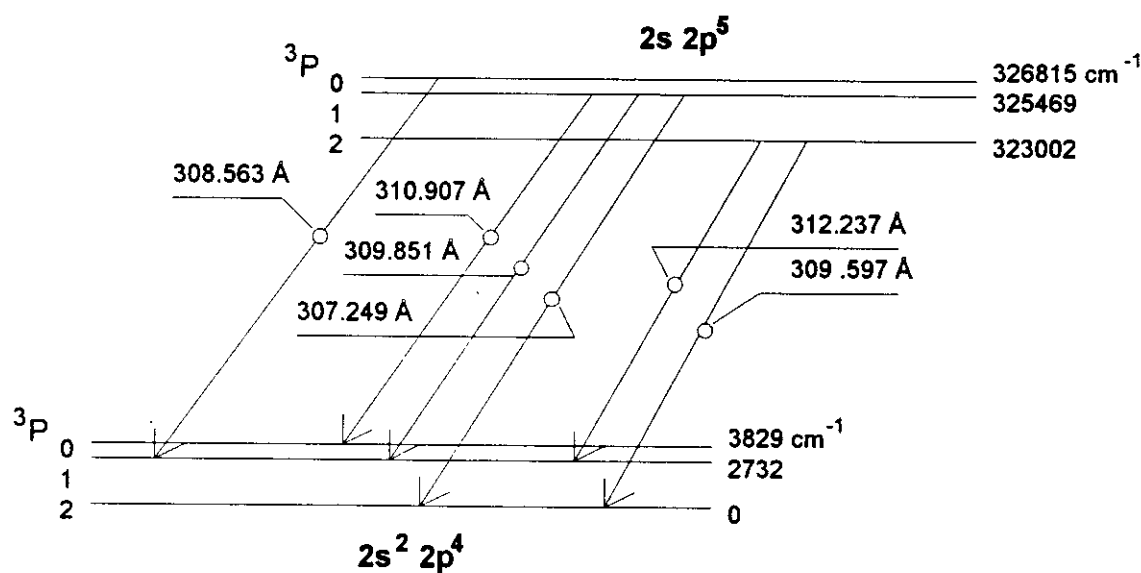


Fig.3B.1. Diagrama de Grotrian del multiplete $2s2p^5\ ^3P^o \rightarrow 2s^2\ 2p^4\ ^3P$ de Al VI.

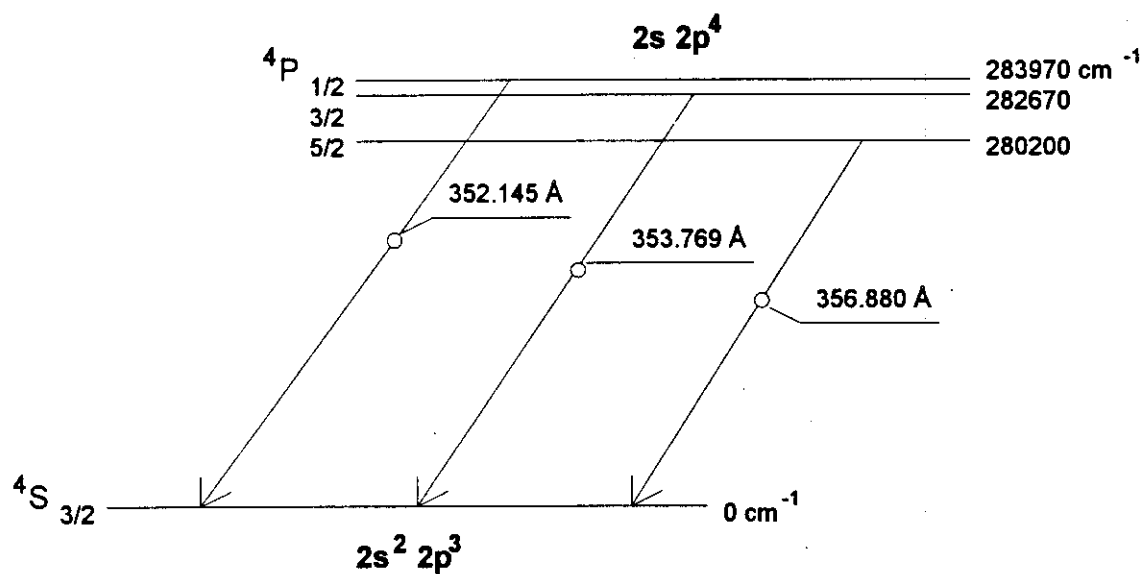


Fig.3B.2. Diagrama de Grotrian del multiplete $2s2p^4 \ ^4P \rightarrow 2s^2 2p^3 \ ^4S_{3/2}$ de Al VII.

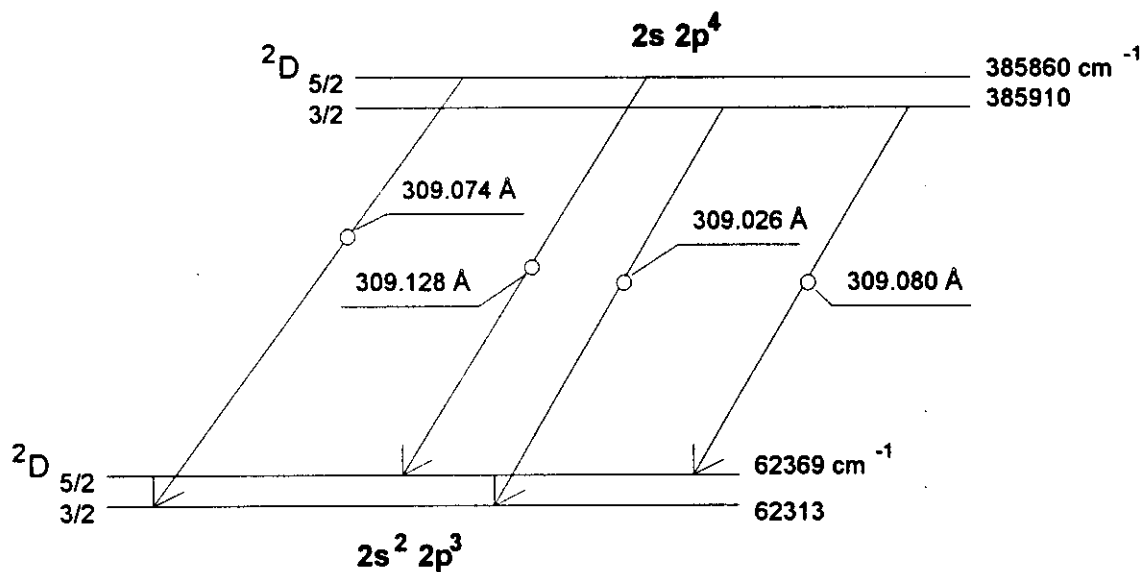


Fig.3B.3. Diagrama de Grotrian del multiplete $2s2p^4 \ ^2D \rightarrow 2s^2 2p^3 \ ^2D^o$ de Al VII.

B2. ESPECTROS OBTENIDOS

Se han obtenido las líneas del multiplete de $Al\ VI$ en distintas condiciones experimentales (irradiancia del láser y distancia de observación a la superficie de la muestra) y en distintos órdenes de difracción (desde el 1° al 5° orden). El espectro que se ha elegido para calcular las intensidades relativas de este multiplete de $Al\ VI$ ha sido el tercer orden porque en primer y segundo orden las líneas no están suficientemente resueltas. Por otro lado no se ha seleccionado el cuarto ni quinto orden porque las líneas del multiplete que queremos estudiar se ven mezcladas con otras líneas de $Al\ IV$ en el primer orden. Aún así, en el tercer orden hay una línea de $Al\ II$ de 932.9382 Å que se mezcla con la línea 310.907 Å. Por tanto se ha medido en el espectro de primer orden la intensidad relativa correspondiente a esta línea con respecto a la de 308.563 Å, pues en dicho orden no hay mezcla de otras especies iónicas. Como en tercer orden sabemos la intensidad relativa de la línea de 308.563 Å con respecto a las demás, entonces podemos saber la de 310.907 Å.

Como se puede apreciar en las figs.3B.4-5 las intensidades relativas de las líneas varían apreciablemente cuando elevamos la irradiancia de $10^9\ W/cm^2$ a $10^{10}\ W/cm^2$, mostrando que efectivamente hay problemas de autoabsorción. Éstos problemas serán objeto de estudio en la siguiente sección.

También se puede observar en las figs.3B.4-5 a baja irradiancia las líneas de $Al\ VI$ desaparecen dominando las líneas de $Al\ IV$.

En el caso del multiplete $2s2p^4\ ^4P \rightarrow 2s^2\ 2p^3\ ^4S_{3/2}$ de $Al\ VII$ los espectros se han obtenido en primer orden ya que no existen problemas de solapamiento. En las figs.3B.6-7 se pueden comparar los resultados obtenidos en condiciones de alta y baja irradiancia. Como bien se puede observar la intensidad relativa de las líneas depende de la irradiancia, como en el caso de las líneas de $Al\ VI$ presentadas anteriormente, indicando la existencia de autoabsorción. (Cfr.Secc.B3).

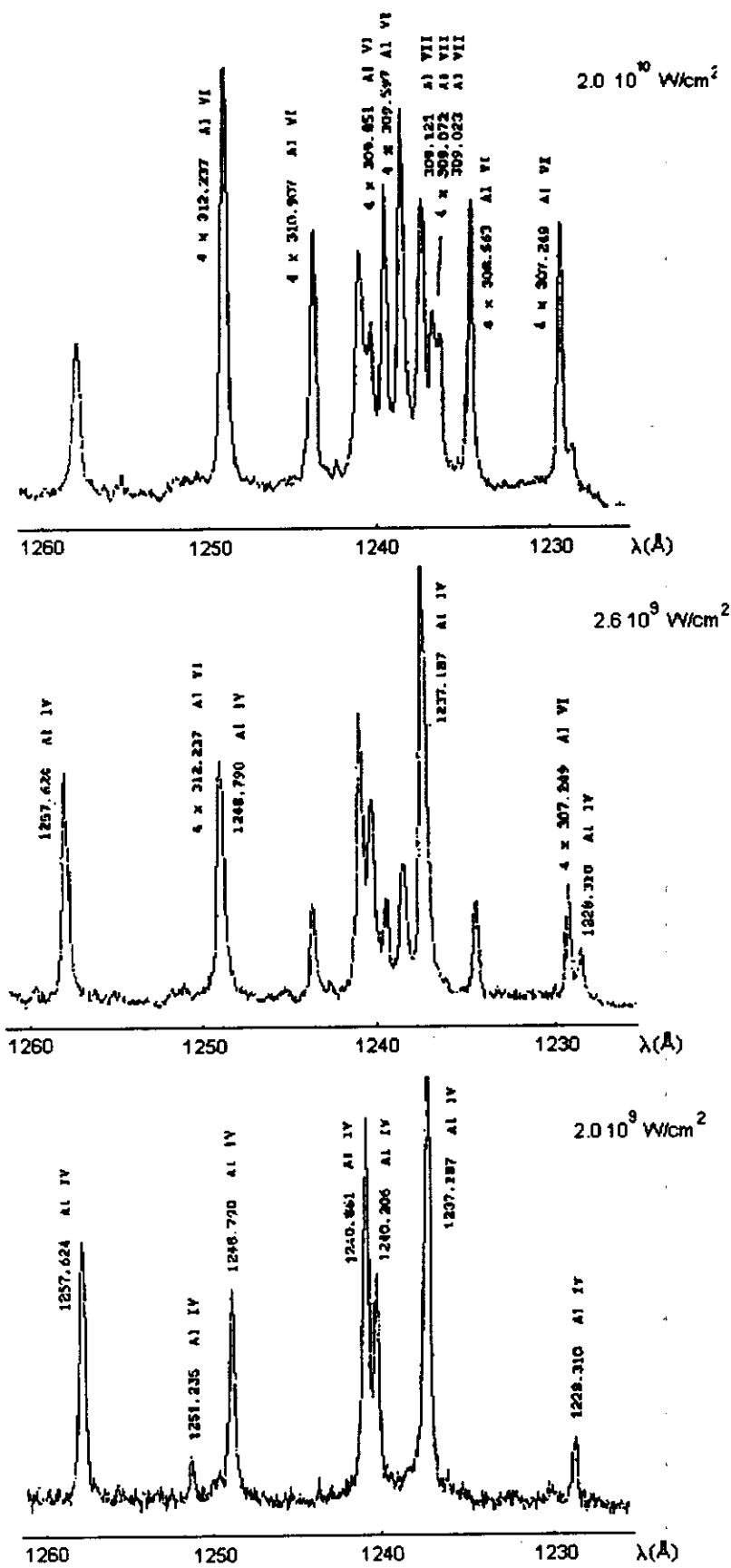


Fig.3B.4. Comparación del cuarto orden del multiplete con origen en la configuración $2s2p^5\ ^3P$ de Al VI a distintas irradiancias.

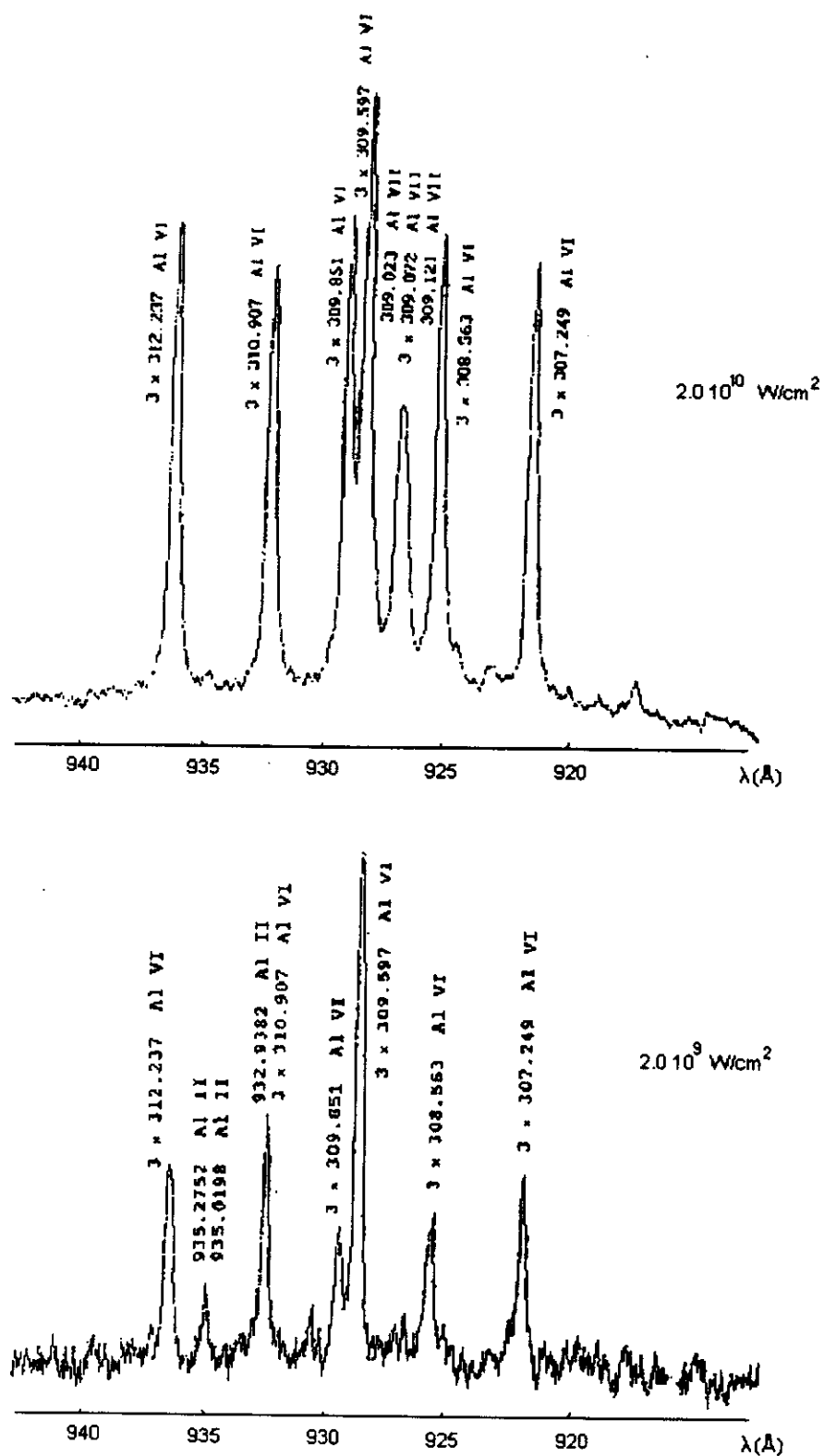


Fig.3B.5. Comparación del tercer orden del multiplete con origen en la configuración $2s2p^5 \ ^3P$ de Al VI a distintas irradiancias.

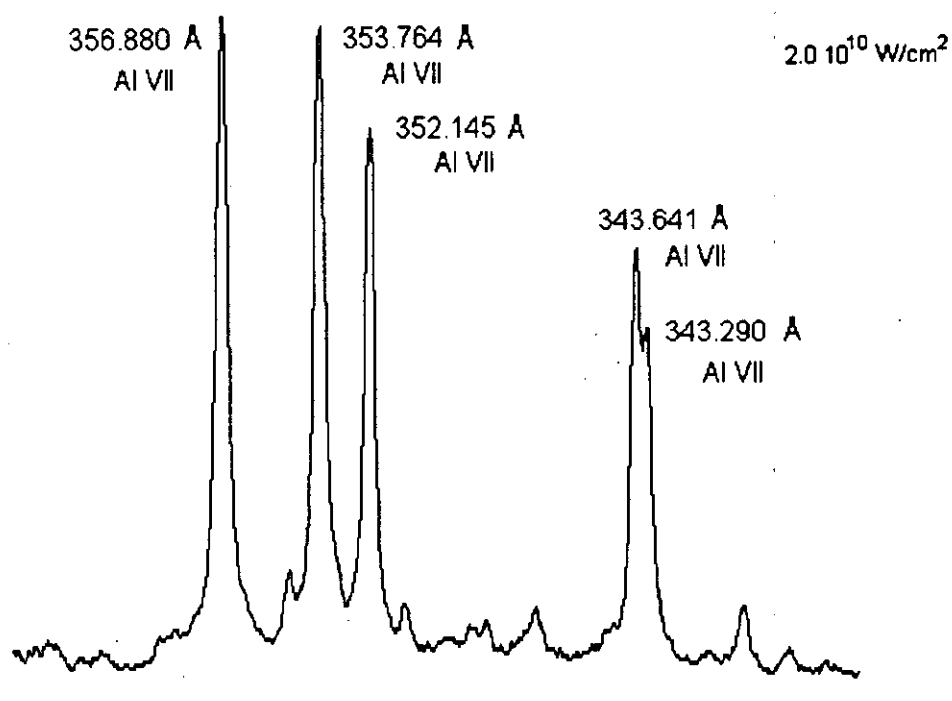


Fig.3B.6. Líneas con origen en la configuración $2s2p^4\ ^4P$ de Al VII en condiciones de alta irradiancia.

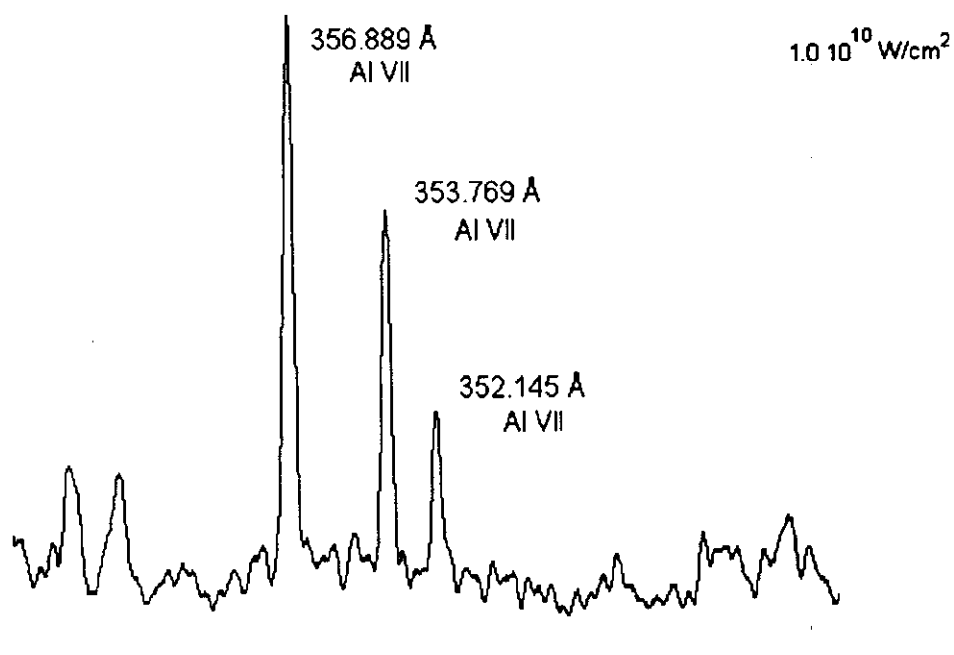


Fig.3B.7. Líneas con origen en la configuración $2s2p^4\ ^4P$ de Al VII en condiciones de baja irradiancia.

Las líneas de 309 Å con origen en la configuración $2s2p^4\ ^2D$ de Al VII (fig.3B.8), se han obtenido en quinto orden.

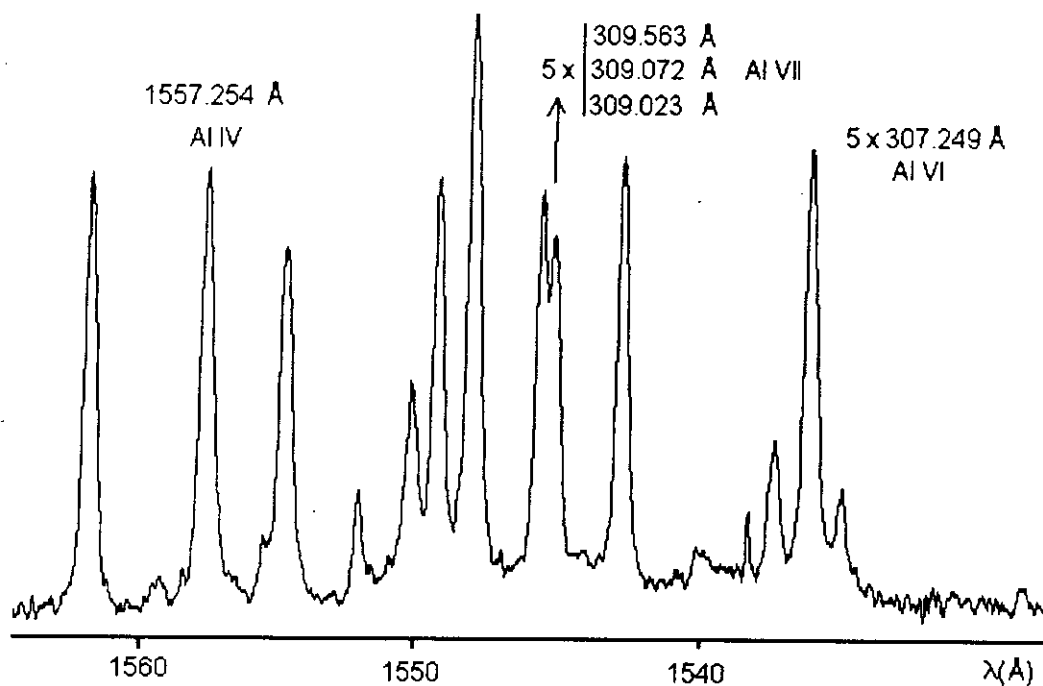


Fig.3B.8. Espectro de las líneas con origen en la configuración $2s2p^4\ ^2D$ de Al VII en quinto orden.

Para medir las intensidades de las líneas se ha empleado un programa de ordenador que ajusta los perfiles experimentales a perfiles de Voigt.

B3. AUTOABSORCIÓN

Como se ha visto anteriormente las líneas de los multipletes estudiados $2s2p^5\ ^3P^o \rightarrow 2s^2\ 2p^4\ ^3P$ del Al VI y $2s2p^4\ ^4P \rightarrow 2s^2\ 2p^3\ ^4S_{3/2}$ del Al VII están autoabsorbidas, ya que su intensidad relativa varía al variar las condiciones de medida. Para determinar la presencia de autoabsorción existen varios métodos:

1. Comprobación de las razones de intensidad dentro de un mismo multiplete que se esperan que coincidan con los previstos por el acoplamiento LS. Si las líneas están autoabsorbidas las razones de la intensidad se pueden variar hasta alcanzar la proporción esperada de varias maneras:
 - 1a) Variando la concentración de la especie en estudio, ya que el coeficiente de autoabsorción $k(\nu)$ depende de la población del nivel inferior (ec.1.16).
 - 1b) Duplicando la longitud del camino óptico^(*), emplazando un espejo cóncavo en el lado contrario del plasma respecto de la rendija de entrada. Si la señal se duplica (descontando pérdidas de reflexión y transmisión), entonces no existe autoabsorción.
 - 1c) Variando las condiciones experimentales en las que se forma el plasma, (como enfoque, irradiancia) y en las que éste se observa (distancia a la superficie de la muestra), de tal manera que la fuente de radiación sea ópticamente delgada.
2. Comparar la intensidad calculada que emitiría la radiación de cuerpo negro a la temperatura y longitud de onda de la línea en cuestión, con la intensidad real observada. Si el pico de intensidad es suficientemente menor que el límite calculado para el cuerpo negro, puede considerarse entonces que la línea no está autoabsorbida (ec.1.17).

Con el primer método nos hemos encontrado multitud de problemas para variar la concentración de la muestra realizando aleaciones de aluminio con estaño y titanio, porque en el margen espectral de interés existen multitud

^(*) Hay que recordar que cuando el plasma es ópticamente delgado, según (ec.1.18), la intensidad de una línea es proporcional al camino óptico.

Con el primer método nos hemos encontrado multitud de problemas para variar la concentración de la muestra realizando aleaciones de aluminio con estaño y titanio, porque en el margen espectral de interés existen multitud de líneas intensas que se solapan fuertemente con las de aluminio. También se utilizó cerámica, Al_2O_3 , pero ocurría el mismo problema con líneas de oxígeno, aunque menos acusadamente. Lo que se ha hecho es optimizar las condiciones experimentales que minimizan la autoabsorción.

El segundo método es de difícil aplicación porque en este margen espectral no hay apenas líneas de especies de alto grado de ionización con probabilidad de transición conocidas con precisión, necesarias para realizar un diagrama de Boltzmann y hallar la temperatura (ec.1.21).

El presente estudio sobre la autoabsorción se ha centrado en el multiplete resonante de Al VII que cuenta con las líneas de 352.14 Å, 353.77 Å y 356.88 Å, utilizando muestras de aluminio de 99.99% de pureza y de polvo de LiAlH_4 compactado.

El parámetro experimental que presenta más variabilidad para la autoabsorción ha sido la distancia de enfoque (lente-blanco). En la fig.3B.9 se presenta un gráfico de cómo varía la intensidad relativa de las líneas de 356.88 Å y 353.77 Å con respecto a la de 352.14 Å, todas ellas pertenecientes al multiplete de $2s2p^4\ ^4P \rightarrow 2s^2\ 2p^3\ ^4S_{3/2}$ de Al VII.

Se ha tomado como referencia la línea menos intensa porque el coeficiente de autoabsorción es proporcional a la intensidad de la línea, de tal manera que será la línea menos susceptible de estar autoabsorbida. Según el acoplamiento LS la intensidad relativa de estas líneas debe ser 1:2:3 viniendo representada en la fig.3B.9 por las líneas horizontales^(*).

(*) Es razonable que se verifique el acoplamiento LS porque el nivel más cercano en energía se encuentra a más de 100000 cm^{-1} , no esperándose mezcla de configuraciones. Según los cálculos de Biémont (ver tabla 3B.2) las probabilidades de transición para este multiplete de Al VII son muy parecidas por lo que haciendo uso de (ec.1.20) y sabiendo que la población es proporcional al peso estadístico $2J+1$, la intensidad relativa viene dada por: $\frac{I_J}{I_{J'}} \approx \frac{2J+1}{2J'+1}$

Se puede apreciar que la línea de 353.77 Å alcanza la proporción teórica con respecto a la de 353.77 Å, con cierta facilidad en el caso de el LiAlH_4 mientras que en el caso del aluminio puro solo se alcanza en condiciones de perfecto enfoque. Ésto es debido a que en un plasma de aluminio puro la densidad de iones de Al VII será mayor que el caso del hidruro de aluminio litio, siendo en el primer caso mayor el coeficiente de autoabsorción (ec.1.22).

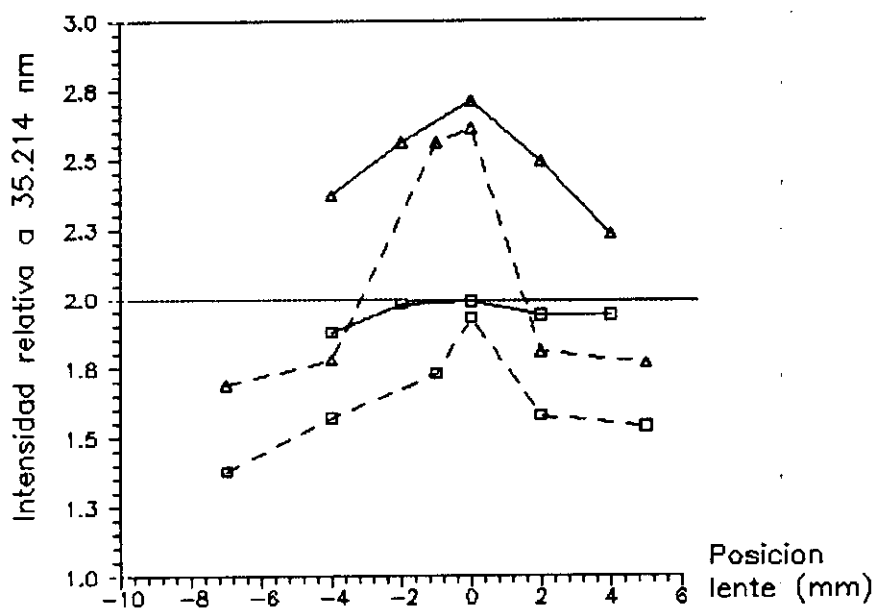


Fig.3B.9. Intensidad relativa a la línea de 352.14 Å, de las líneas de $\Delta \rightarrow 356.88 \text{ Å}$ $\square \rightarrow 353.77 \text{ Å}$ -- Al puro — LiAlH_4

La posición "cero" de la lente indica que la distancia lente-muestra corresponde a la distancia focal ($f=22.5 \text{ cm}$).

La línea de 356.88 Å es más intensa y por tanto se autoabsorbe más, quedando más lejos de la proporción teórica. Tanto el aluminio puro como el hidruro de aluminio litio presentan un máximo en condiciones de perfecto enfoque, es decir a elevada irradiancia. Es en estas condiciones cuando aparecen un par de líneas de Al X (332.891 y 332.78 Å), fig.3B.10, lo que indica que al subir la irradiancia estamos despoblando el Al VII para poblar iones superiores, de tal manera que disminuye la densidad de átomos de Al VII y por tanto su coeficiente de autoabsorción (ec.1.22).

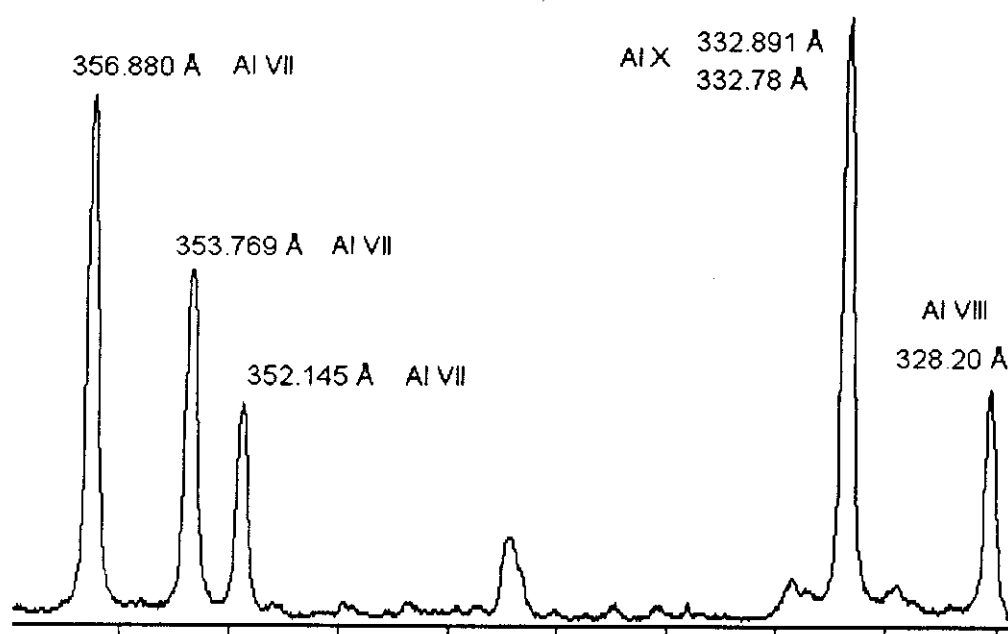


Fig.3B.10. Espectro de Al VII en condiciones de máximo enfoque del haz láser sobre la muestra. Aparecen líneas de Al VIII y Al X.

De todas maneras elevando al máximo la irradiancia no conseguimos eliminar toda la autoabsorción por lo que se procede a disminuirla de tal forma que se despueble la especie de *Al VII* para poblar iones de menor grado de ionización. Se ha hecho variar la irradiancia bajando la tensión de las lámparas de flash del láser, en condiciones de perfecto enfoque, llegando a observar la proporción teórica en unas condiciones límite, porque si bajamos más la irradiancia las líneas de *Al VII* desaparecen por lo que no hemos llegado a determinar exactamente si hemos eliminado toda la autoabsorción. Para saberlo sería sugerible poner la fuente de radiación del plasma en la focal de un espejo toroidal de ultravioleta de vacío y ver si se duplica la señal (teniendo en cuenta las pérdidas por reflexión y transmisión), tal y como se indicó en el apartado 1b) de esta sección.

El espectro obtenido en el caso límite de baja irradiancia es el presentado en la fig.3B.7. En la fig.3B.11 se muestra la variación de las intensidades relativas con la irradiancia.

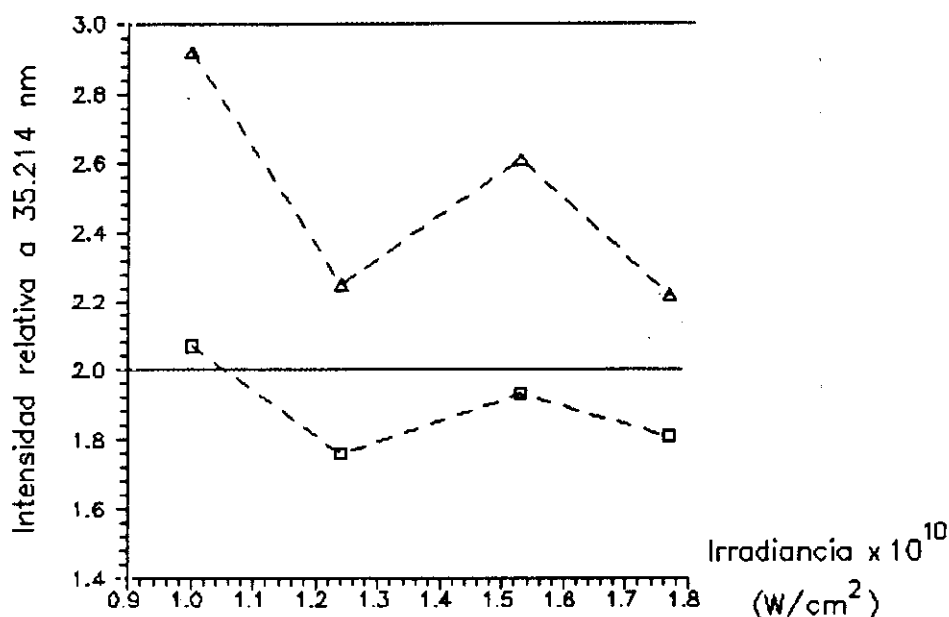


Fig.3B.11. Intensidad relativa a 352.14 Å, de las líneas de $\Delta \rightarrow 356.88 \text{ Å}$ $\square \rightarrow 353.77 \text{ Å}$, con una muestra de aluminio puro.

En condiciones límite de baja irradiancia también se ha medido la intensidad de las líneas del multiplete $2s2p^5 \ ^3P^o \rightarrow 2s^2 2p^4 \ ^3P$ de Al VI, fig.3B.5.

Este multiplete de Al VI se espera que presente más problemas de autoabsorción que el de Al VII por dos motivos:

- Las líneas son intrínsecamente más intensas que las del Al VII (ver tablas 3B.3-4).
- Se han obtenido condiciones de baja irradiancia para despoblar el Al VII lo cual no garantiza que el Al VI se despueble suficientemente.

En las figs.3B.5-7 se muestran los espectros de las líneas tanto de Al VI como del Al VII en condiciones de baja y alta irradiancia. De todas maneras la proporción de intensidades esperable por acoplamiento LS entre las líneas de 309.597 Å y 307.249 Å de Al VI es de 3:1 comprobándose en nuestros espectros (fig.3B.5) una proporción de 2.9:1.

Podemos estimar la densidad óptica $k.D$ de las líneas 356.88 Å y 353.77 Å de la siguiente manera. Según (ec.1.17) la intensidad de una línea viene dada por:

$$I(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} (1 - e^{-kD})$$

$k \rightarrow$ Coeficiente de autoabsorción
 $D \rightarrow$ Tamaño de la fuente

Comparando las intensidades de dos líneas de un mismo multiplete (con longitudes de onda muy similares), y ambas en las mismas condiciones experimentales (misma temperatura, densidad de iones etc...), entonces:

$$\frac{I_l}{I_r} \approx \frac{1 - e^{-k_l D}}{1 - e^{-k_r D}}$$

Donde I_r es la intensidad de referencia de una línea dentro del multiplete. Por otro lado, según (ec.1.22), la relación entre los coeficientes de autoabsorción entre dos líneas del mismo multiplete vendrá dada por la relación de los correspondientes pesos estadísticos.

$$\frac{k_l}{k_r} \approx \frac{g_l}{g_r}$$

Donde hemos considerado que las probabilidades de transición, los niveles de energía y los ensanchamientos Stark son en ambas líneas muy parecidos.

En nuestro caso podemos tomar como línea de referencia la de 352.14 Å ($J=1/2$), entonces tenemos las siguientes relaciones:

$$\left. \begin{aligned} k_{3/2} &= 2k_{1/2} \\ \frac{I_{3/2}}{I_{1/2}} &= \frac{1 - e^{-2k_{1/2}D}}{1 - e^{-k_{1/2}D}} = 1 + e^{-k_{1/2}D} \end{aligned} \right\} \Rightarrow k_{3/2}D = -2 \ln \left(\frac{I_{3/2}}{I_{1/2}} - 1 \right)$$

$$\left. \begin{aligned} k_{5/2} &= 3k_{1/2} \\ \frac{I_{5/2}}{I_{1/2}} &= \frac{1 - e^{-3k_{1/2}D}}{1 - e^{-k_{1/2}D}} = 1 + e^{-2k_{1/2}D} + e^{-k_{1/2}D} \end{aligned} \right\} \Rightarrow k_{5/2}D = -3 \ln \left(-\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{I_{3/2}}{I_{1/2}} - \frac{3}{4}} \right)$$

Cuando se satisface la proporción teórica de intensidades predicha por el acoplamiento LS ($I_J/I_{J'} = 2J+1/2J'+1$), estas expresiones dan un valor de $k.D = 0$.

Con estas expresiones y las relaciones de intensidades medidas (fig.3B.9), podemos hacer una estimación para la densidad óptica de las líneas 356.88 Å ($J=5/2$) y 353.77 Å ($J=3/2$), tal y como se representa en la fig.3B.12.

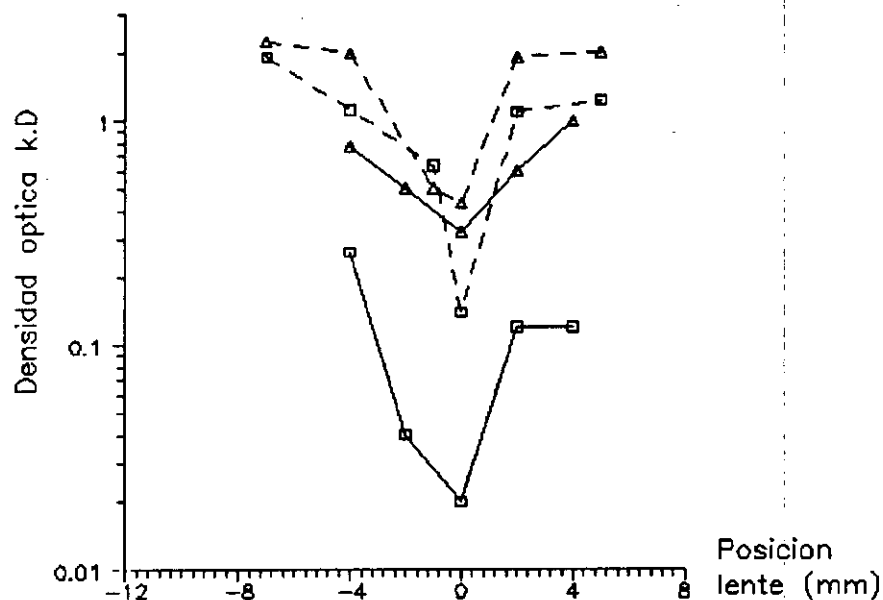


Fig.3A.12. Densidad óptica de las líneas:

$\Delta \rightarrow 356.88 \text{ Å}$ $\square \rightarrow 353.77 \text{ Å}$ de -- Al puro -- LiAlH₄

En la fig.3B.12 también se puede ver que el valor menor de $k.D$ se obtiene para la línea de menor intensidad (353.77 Å) y en el caso de las medidas realizadas con LiAlH₄, pues en este compuesto la proporción de aluminio es menor que en el caso del Al puro. Para la línea de mayor intensidad (356.88 Å) el criterio de fuente ópticamente delgada $k.D \ll 1$ (ec.1.18), no se llega a satisfacer suficientemente.

B5. PROBABILIDADES DE TRANSICIÓN.

Aluminio VI

Haciendo uso del método de la vida media dado en la secc.A2, (ecs. 3.7-10), se ha llevado a cabo la determinación de las probabilidades de transición espontáneas absolutas, a partir de las intensidades relativas obtenidas experimentalmente en las condiciones en las que se supone que no hay autoabsorción (Cfr.Secc.B3).

En la tabla 3B.1. se presentan las intensidades relativas experimentales obtenidas en este trabajo de las líneas resonantes de Al VI y se comparan con las obtenidas teóricamente por Fawcett^{3B.4}, Vilkas^{3B.6}, Campos*.

TRANSICIÓN Niveles Superior → Inferior	λ (Å)	INTENSIDAD RELATIVA			
		Experimental (este trabajo)	Teórica		
			Fawcett ^{3B.4}	Campos*	Vilkas ^{3B.6}
$^3P_1^o \rightarrow ^3P_2$ 3P_1 3P_0	307.249	34.6 ± 1.8	34.1	34.2	34.19
	309.851	20.0 ± 2.0	19.9	20.0	19.98
	310.907	29.0 ± 1.5	26.4	26.4	26.35
$^3P_2^o \rightarrow ^3P_2$ 3P_1	309.597	100	100	100	100
	312.237	36.1 ± 1.8	32.6	32.6	32.55
$^3P_0^o \rightarrow ^3P_1$	308.563	26.9 ± 1.3	26.9	27.0	26.99

Tabla 3B.1. Intensidades relativas del multiplete estudiado de Al VI.

* Comunicación privada.

Por último se presentan en las tablas 3B.2-3 los resultados de las probabilidades de transición absolutas obtenidas a partir de las intensidades relativas y las vidas medias mencionadas anteriormente. Estos resultados que hemos obtenido experimentalmente se comparan con los obtenidos teóricamente (Fawcett^{3B.4}, Bièmont^{3B.5} y Campos) con el código de Cowan^{3A.3} que utiliza un algoritmo de Hartree-Fock y un ajuste de mínimos cuadrados; y con los obtenidos por Vilkas^{3B.6}, que utiliza la teoría de perturbaciones estacionaria de segundo orden del hamiltoniano efectivo. La concordancia entre los resultados teóricos y experimentales se considera suficientemente buena.

TRANSICIÓN Niveles Superior → Inferior	λ (Å)	PROBABILIDADES DE TRANSICIÓN ABSOLUTAS (10^9 s^{-1})			
		Experimental (este trabajo)	Teórica		
			Fawcett ^{3B.4}	Campos*	Vilkas ^{3B.6}
$^3P_1^o \rightarrow ^3P_2$ 3P_1 3P_0	307.249	5.77 ± 0.29	5.393	5.91	4.214
	309.851	3.34 ± 0.33	3.149	3.46	2.463
	310.907	4.83 ± 0.24	4.163	4.56	3.248
$^3P_2^o \rightarrow ^3P_2$ 3P_1	309.597	10.12 ± 0.51	9.478	10.38	7.395
	312.237	3.65 ± 0.18	3.092	3.38	2.407
$^3P_0^o \rightarrow ^3P_1$	308.563	14.01 ± 0.70	12.75	14.01	9.979

Tabla 3B.2. Probabilidades de transición de las líneas con origen en la configuración $2s2p^3 \ ^3P$ del Al VI.

* Comunicación privada.

Se presenta un ejemplo de cómo han sido obtenidos nuestros valores a partir de las intensidades relativas medidas y las vidas medias calculadas teóricamente por Campos* ($\tau_0 = 0.0717 \text{ ns}$, $\tau_1 = 0.0726 \text{ ns}$, $\tau_2 = 0.0714 \text{ ns}$).

$$(Ec.3.7) \rightarrow A_{12} = \frac{1}{\tau_1} \frac{I_{12}}{I_{12} + I_{11} + I_{10}}$$

Aluminio VII

TRANSICIÓN Niveles Superior → Inferior	λ (Å)	PROBABILIDAD DE TRANSICIÓN ABSOLUTA (10^9 s^{-1})		INTENSIDAD RELATIVA	
		Experimental (este trabajo)	Teórica Bièmont ^{3B.5}	Experimental (este trabajo)	Teórica Bièmont ^{3B.5}
$4P_{1/2} \rightarrow 4S_{3/2}$	352.145	3.07 ± 0.24	3.87	32.9 ± 1.6	41.48
$4P_{3/2}$	353.769	2.91 ± 0.23	3.84	62.5 ± 3.1	77.97
$4P_{5/2}$	356.880	3.11 ± 0.24	3.72	100	100

Tabla 3B.3. Probabilidades de transición de las líneas con origen en la configuración $2s2p^4 \text{ } ^4P$ del Al VII.

A continuación se presentan las ecuaciones a resolver para determinar los valores de la tabla anterior.

$$(\text{Ecs.3.8}) \rightarrow \begin{cases} I_{1/2 \ 3/2} = k \cdot 2 \cdot A_{1/2 \ 3/2} \\ I_{3/2 \ 3/2} = k \cdot 4 \cdot A_{3/2 \ 3/2} \\ I_{5/2 \ 3/2} = k \cdot 6 \cdot A_{5/2 \ 3/2} \end{cases}$$

$$(\text{Ec.3.10}) \rightarrow \frac{3}{\tau} = A_{1/2 \ 3/2} + A_{3/2 \ 3/2} + A_{5/2 \ 3/2}$$

$n^\circ \text{ niveles } J = 3$

Resolviendo por ejemplo para $A_{1/2 \ 3/2}$:

$$A_{1/2 \ 3/2} = \frac{3 I_{1/2 \ 3/2}}{\tau \left(I_{1/2 \ 3/2} + \frac{1}{2} I_{3/2 \ 3/2} + \frac{1}{3} I_{5/2 \ 3/2} \right)} \quad k = \frac{I_{1/2 \ 3/2}}{2 A_{1/2 \ 3/2}}$$

Una vez determinada la constante k se pueden determinar el resto de las probabilidades de transición. Para la vida media se ha tomado el valor experimental de Kernahan^{3B.3} ($\tau = 0.33 \pm 0.2 \text{ ns}$). Los errores se han obtenido sumando cuadráticamente el error relativo de la vida media y el de la intensidad que hemos estimado en un 5%.

Para las líneas no resonantes de Al VII de 309 Å se presentan en la tabla 3B.4 las intensidades relativas determinadas experimentalmente, comparadas con las teóricas obtenidas a partir de los datos de las probabilidades de transición.

TRANSICIÓN Niveles Superior → Inferior	λ (Å)	INTENSIDADES RELATIVAS	
		Teórica Bièmont ^{3B.5}	Experimental (este trabajo)
$2s2p^4\ ^2D_{3/2} \rightarrow 2s^22p^3\ ^2D_{3/2}$	309.023	67.6	82 ± 16
$^2D_{5/2}$	309.072	5.9	15 ± 4
$^2D_{5/2} \rightarrow\ ^2D_{3/2}$	309.072	5.5	
$^2D_{5/2}$	309.121	100	100

Tabla 3B.4. Intensidades relativas de las líneas de Al VII con origen en la configuración $2s2p^4\ ^2D$.

Al encontrarse en este multiplete las longitudes de onda tan próximas unas de otras, resulta muy difícil resolverlo, habiéndose tenido que recurrir al quinto orden de difracción (fig.3B.8). En cualquier caso no se ha encontrado en la bibliografía existente ningún dato experimental de probabilidades de transición para estas líneas de 309 Å de Al VII.

C. AZUFRE II

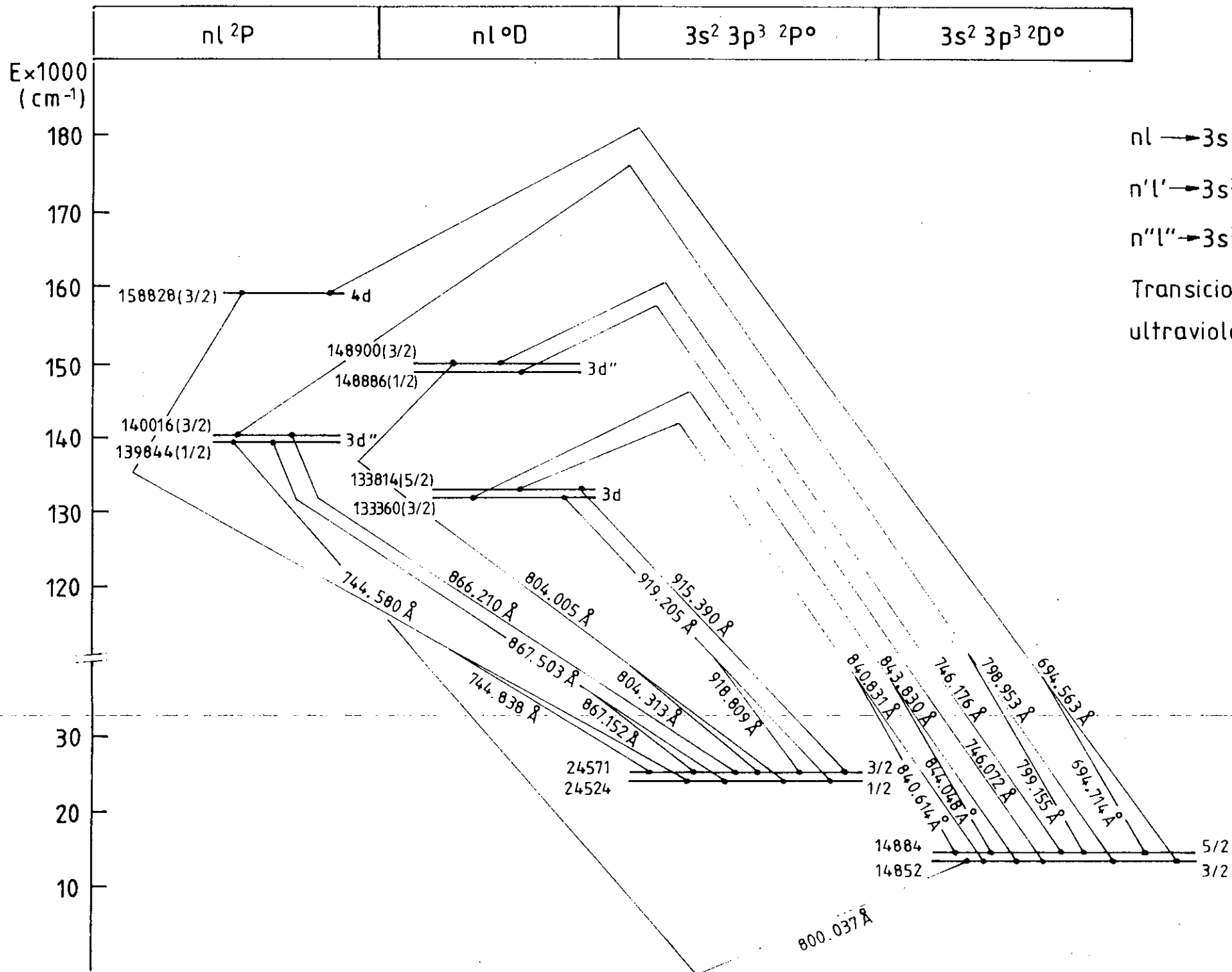
C1. MEDIDAS EN EL ULTRAVIOLETA DE VACÍO

En la región del ultravioleta de vacío son escasos los datos existentes, tanto experimentales como teóricos, sobre las probabilidades de transición de azufre ionizado S II, existiendo discrepancias entre ambos valores para algunos casos. Recientemente Kaufmann y Martin^{3C.1} han publicado una nueva compilación de niveles de energía y longitudes de onda del azufre, con la cual será posible determinar nuevas razones de probabilidades de transición y comparar con los cálculos teóricos para estimar la bondad de las aproximaciones realizadas

Con la calibración del sistema experimental descrito en el cap.1A, obtenida anteriormente mediante el espectro continuo de un plasma de wolframio y el método de las razones de ramificación (cap.2), y a partir de la medida de intensidades relativas de líneas; se han determinado siete razones de probabilidades de transición de líneas de S II de las que para cuatro de ellas no se conoce ningún valor experimental.

Para determinar las intensidades de estas líneas de S II se ha tomado como muestra ZnS cristalizado (mineral de blenda acaramelada). La ventaja de este tipo de material sólido es que resiste bastante bien la ablación láser generándose un cráter pequeño. Además, en las condiciones experimentales estudiadas, las líneas de zinc son muy poco intensas en el margen espectral del ultravioleta de vacío no interfiriendo con las líneas de azufre en la zona de interés. La muestra se encuentra girando y está situada en una cámara a una presión menor que 10^{-5} mbar. Como se ha dicho anteriormente, la expansión del plasma tiene lugar en la dirección perpendicular a la superficie de la muestra, siendo posible el estudio del plasma a diferentes distancias del blanco. El número de disparos acumulados en cada espectro ha sido de 200.

Las transiciones medidas se detallan en la tabla 3C.1 comparándose con otros valores, tanto experimentales (Cunningham^{3C.2}) como teóricos (Ho^{3C.3}, Hibbert^{3C.4}, Aymar^{3C.11}).



C1.2 Razones de probabilidades de transición.

Longitudes de onda (Å)	Transición Nivel superior	Razones de probabilidades de transición A_i/A_j					
		Experimental		Teórico			
		Este trabajo	Cunn. Ref.3C.2	Ho Ref.3C.3	Hibbert Ref.3C.4	Aymar Ref.3C.11	Fawcett Ref.3C.14
$\frac{694.6}{744.7}$	$3s^2 3p^2(^3P)4d^2 P_{3/2}$	0.69 ± 0.14					
$\frac{746.0}{804.2}$	$3s^2 3p^2(^1S)3d^2 D$	0.33 ± 0.06		0 ^a $0.037 / 0.040^b$			0.31
$\frac{799.4}{866.7}$	$3s^2 3p^2(^1D)3d^2 P$	0.99 ± 0.20	0.62 ± 0.03				6.91
$\frac{840.7}{915.4}$	$3s^2 3p^2(^3P)3d^2 D_{5/2}$	1.49 ± 0.30		$0.44 / 0.64^a$ $0.79 / 0.79^b$	$0.86 / 0.99^b$		1.54
$\frac{843.9}{919.0}$	$3s^2 3p^2(^3P)3d^2 D_{3/2}$	0.96 ± 0.20	0.66 ± 0.04				1.26
$\frac{937.5}{1031.1}$	$3s^2 3p^2(^1D)4s^2 D$	3.46 ± 0.69	1.37 ± 0.09	$4.09 / \dots^a$ $6.08 / 5.86^b$		3.86^c	6.85
$\frac{1014.3}{1124.7}$	$3s^2 3p^2(^3P)4s^2 P_{3/2}$	2.22 ± 0.45	2.72 ± 0.17	$2.35 / \dots^a$ $2.67 / \dots^b$	$2.98 / \dots^b$	2.14^c	3.07
$\frac{1019.5}{1131.3}$	$3s^2 3p^2(^3P)4s^2 P_{1/2}$	2.25 ± 0.45				2.62^c	2.54

Tabla 3C.1. Razones de probabilidades de transición de transiciones de S II en el ultravioleta de vacío.

.../... Cálculos en aproximación de longitud y velocidad respectivamente.

^a Cálculos de Hartree-Fock sin interacción de configuraciones.

^b Cálculos de Hartree-Fock usando interacción de configuraciones.

^c Cálculos con un potencial paramétrico e interacción de configuraciones.

C1.3 Resolución Espacial

Se han obtenido espectros a diferentes distancias de la superficie de la muestra. Un ejemplo de los espectros obtenidos se presenta en la fig.3C.1 donde se puede ver que la emisión del plasma cambia notablemente dependiendo de la región que se esté observando, siendo posible seleccionar solamente las líneas de S II de interés.

A una distancia próxima al blanco (0.5 mm) aparece una fuerte emisión continua junto con líneas ensanchadas de S IV y VI (fig.3C.1b). Cerca de la superficie de la muestra estamos observando los inicios de formación del plasma en los que la ablación láser produce una fuerte ionización de las partículas, generándose una alta densidad electrónica. Esta alta densidad electrónica produce dos efectos:

1. Gran cantidad de radiación continua de *Bremsstrahlung*.
2. Ensanchamiento por efecto Stark de líneas de especies altamente ionizadas.

A 1.5 mm del blanco, la emisión continua decrece apreciablemente, apareciendo líneas de S II junto con líneas de S IV (fig.3C.1b). Esto es debido a que en una posición más lejana del origen de la ablación, los electrones han tenido tiempo para frenarse de su fuerte aceleración inicial disminuyendo considerablemente la radiación de *Bremsstrahlung*. Además las especies altamente ionizadas ya han empezado a recombinarse apareciendo líneas de S II y disminuyendo por tanto la densidad de electrones.

A 2.5 mm la intensidad relativa de emisión de S IV disminuye frente a la intensidad de las líneas de S II (fig.3C.1a), siendo las líneas más estrechas y llegando a desaparecer la emisión de líneas de S IV a una distancia de 4.5 mm del blanco (fig.3C.1a). En estas dos últimas figuras el proceso de *recombinación* continúa hasta sólo aparecer líneas de S II. También se puede apreciar cómo disminuye el ensanchamiento Stark debido a el decrecimiento en la densidad electrónica.

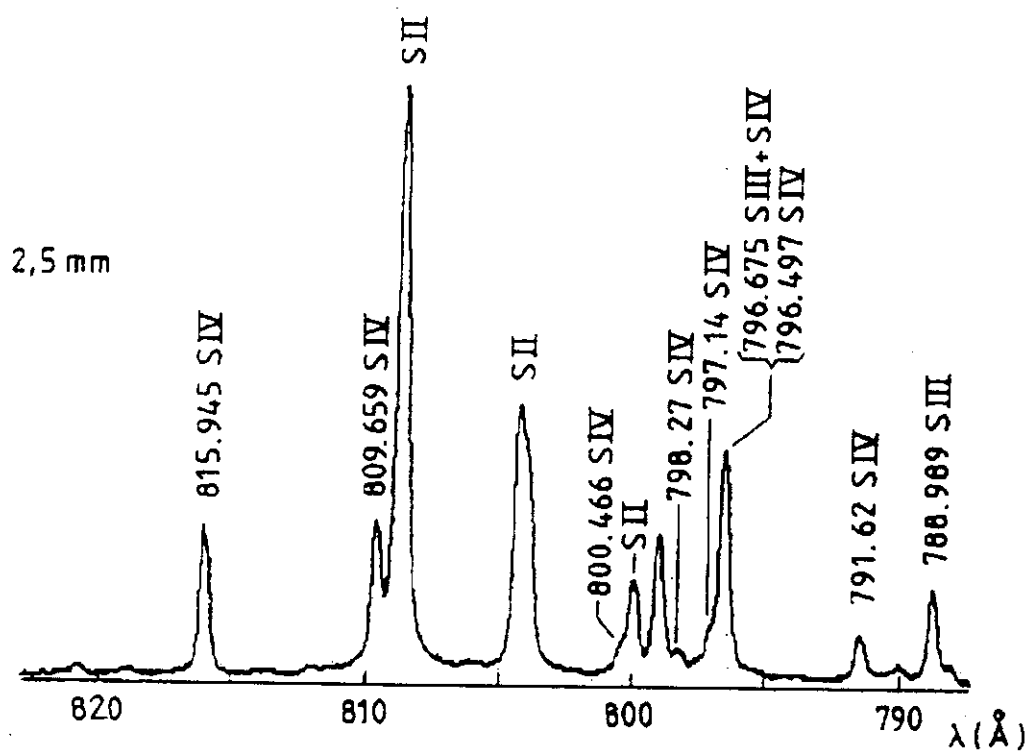
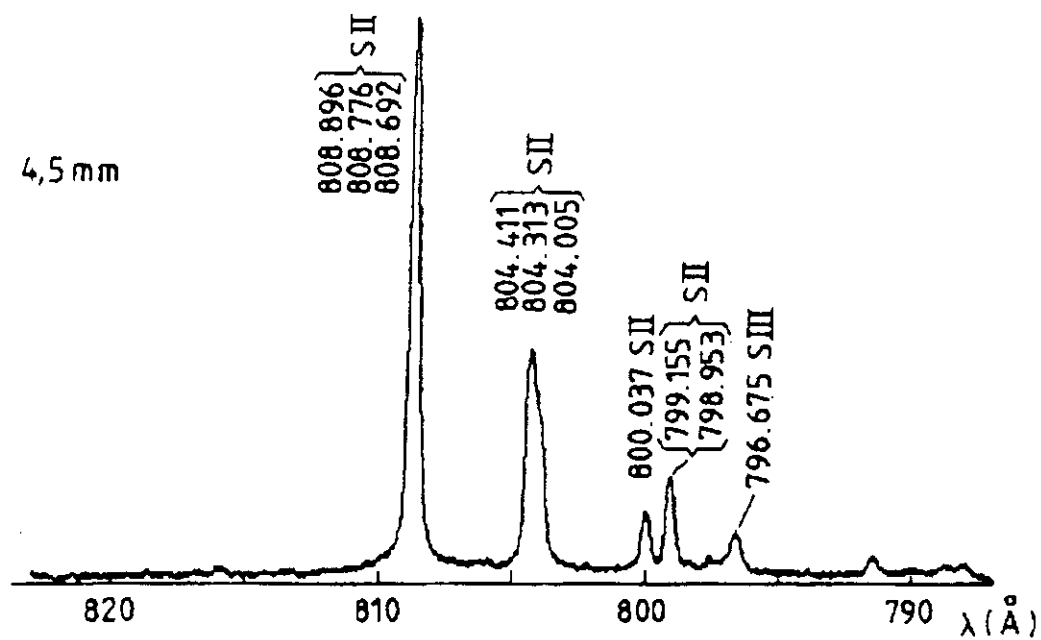


Fig.3C.1a. Resolución espacial de un plasma de ZnS en el ultravioleta de vacío. Espectros tomados a 2.5 y 4.5 mm de la superficie del blanco.

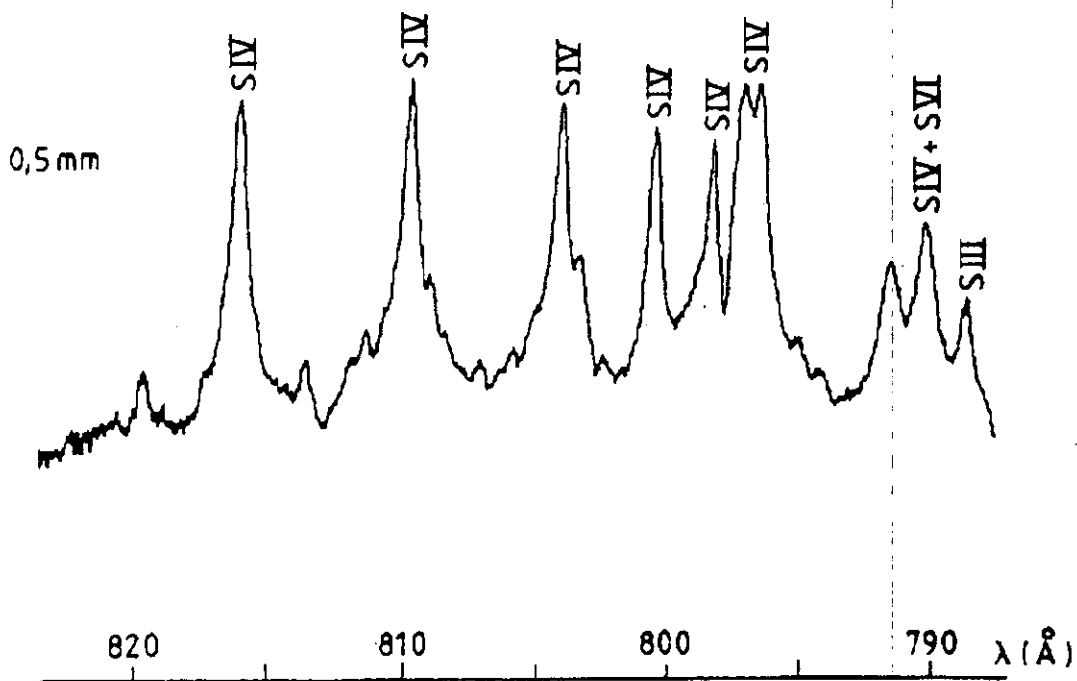
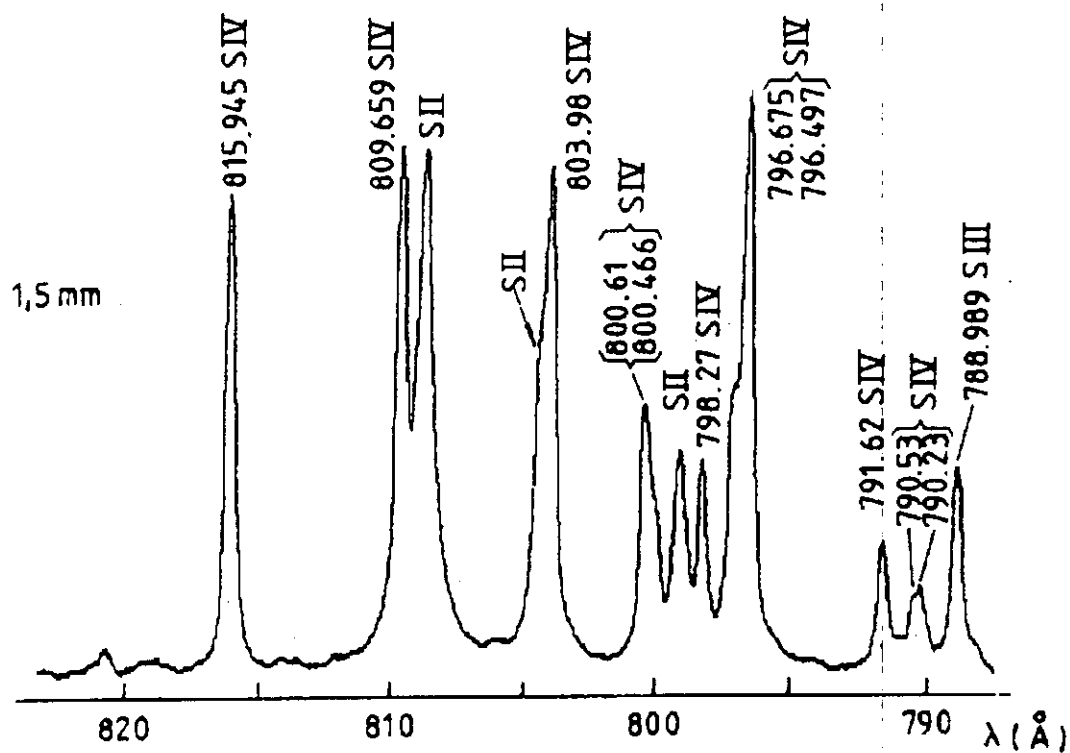


Fig.3C.1b. Resolución espacial de un plasma de ZnS en el ultravioleta de vacío. Espectros tomados a 0.5 y 1.5 mm de la superficie del blanco.

C2. MEDIDAS EN EL ESPECTRO VISIBLE

Al igual que las medidas de $S \text{ II}$ en el ultravioleta de vacío se ha empleado una muestra natural de ZnS cristalizado como blanco, sobre la que se enfoca un láser de Nd:YAG. En el margen espectral visible, haciendo vacío en la cámara donde se genera el plasma, las líneas espectrales no se aprecian, por lo que ha sido necesario introducir una atmósfera de argón. La presión óptima a la que se ven favorecidas las líneas de azufre es de 4 torr. Este efecto de reforzamiento de las líneas es debido a que la presión de argón realiza dos efectos sobre el plasma.

- Mantiene confinado el plasma en un lugar y a unos tiempos más favorables para su observación.
- Favorece los procesos de recombinación teniéndose canales colisionales de desexcitación que antes no se tenían y por tanto reforzando las líneas de emisión de los iones en vuelo que se producen en el plasma.

El sistema experimental para la radiación visible (cap.1B), permite realizar medidas con resolución temporal. En el presente caso se han hecho medidas entre 300 y 900 ns después del impulso láser con una ventana de tiempos de 200 ns. En cada espectro analizado se han acumulado 100 disparos del láser.

La metodología que se ha empleado para el presente estudio ha sido la siguiente:

1) En primer lugar determinar la temperatura a la que se encuentra el plasma, tanto con líneas de $S \text{ II}$ como con líneas de $Ar \text{ II}$ por medio de un diagrama de Boltzmann (ec.1.21)

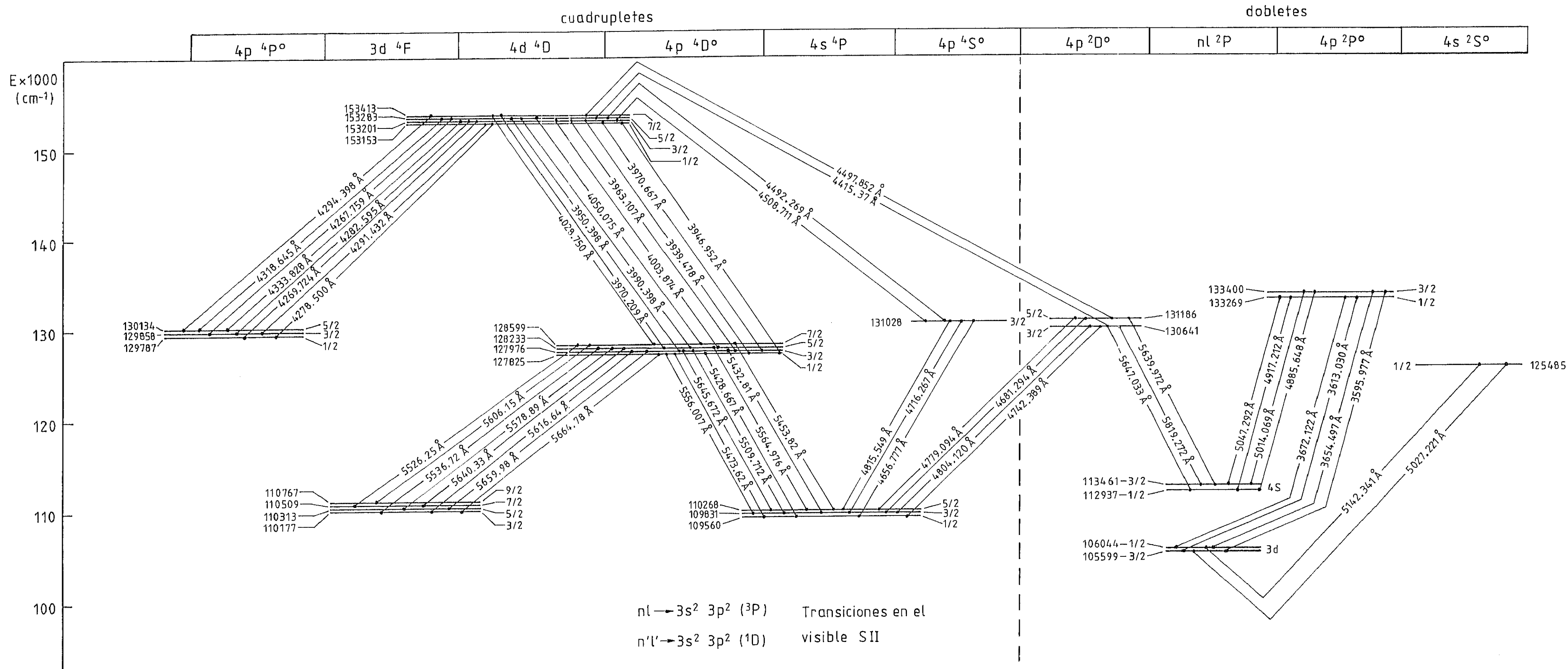
2) Con esta temperatura y a partir del ensachamiento Stark que presentan las líneas, hallar la densidad de electrones.

3) Conocida la densidad de electrones comprobar que utilizando la ley de Saha se obtiene la misma temperatura que la dada en 1). Entonces en nuestras condiciones experimentales es válida la ley de Saha.

4) Con la ley de Saha y la densidad de electrones se determinan las densidades de todas las especies iónicas que coexisten en nuestro plasma.

5) Se determinan también las probabilidades de transición de líneas de S II. Si se han medido las intensidades de todas las transiciones entre dos configuraciones dadas de las probabilidades de transición relativas podemos obtener las absolutas mediante el cálculo de la parte radial (ec.3.6). En el caso de que no haya sido posible medir las intensidades de todas las transiciones entre dos configuraciones se hace uso del método de la temperatura (ec.3.11).

6) Se comprueba que nuestras condiciones experimentales verifican la existencia de equilibrio termodinámico local y delgadez óptica, dando validez a las expresiones teóricas en las que se basan los resultados anteriores.



C2.2 Medida de la temperatura.

Gráficos de Boltzmann

Haciendo uso de (ec.1.21) se realiza un gráfico de Boltzmann para determinar la temperatura del plasma utilizando las transiciones de S II que se detallan en la tabla 3C.2. Las probabilidades de transición que se han tomado son las dadas por NBS^{3C.11}, siendo $g=2J+1$ del nivel superior.

$\lambda(\text{\AA})$	$A_{ij}(10^8 \text{ s}^{-1})$ NBS ^{3C.11}	g_i	$E_i(\text{cm}^{-1})$ Kaufmann ^{3C.1}
4028.9	0.51	8	153414
4145.1	1.80	6	152095
5320.7	0.84	8	140319
5345.7	0.75	6	140230
5428.7	0.38	4	127976
5432.8	0.61	6	128233
5453.8	0.78	8	128599
5659.9	0.34	4	127976
5664.7	0.38	2	127825

Tabla 3C.2. Líneas de S II usadas para calcular la temperatura.

En el caso de las transiciones del Ar II, los valores de las probabilidades de transición que se han utilizado son los presentados por Vujnovic^{3C.5}.

$\lambda(\text{\AA})$	$A_{ij}(10^8 \text{ s}^{-1})$ Vujnovic ^{3C.5}	g_i	$E_i(\text{cm}^{-1})$ Vujnovic ^{3C.5}
3509.8	2.55	2	184192
3514.4	1.36	6	183797
3535.3	0.57	4	183986
3928.6	0.244	4	161049
3968.4	0.048	6	157673
4013.9	0.105	8	157234
4042.9	0.406	4	173348
4726.9	0.588	4	159393
4735.9	0.580	4	155351
4764.9	0.64	4	160239

Tabla 3C.3. Líneas de Ar II usadas para calcular la temperatura.

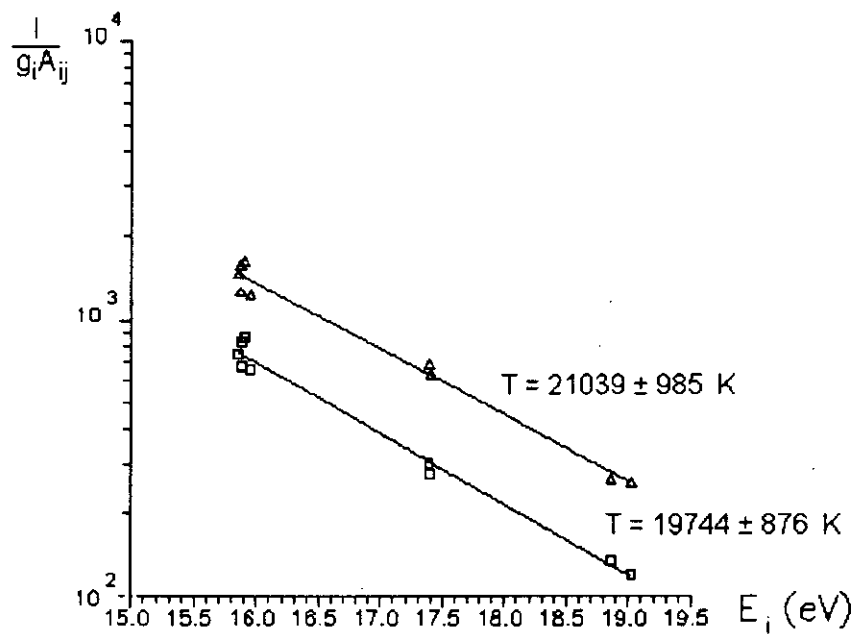


Fig.3C.2. Gráfico de Boltzmann para determinar la temperatura en el plasma utilizando líneas de S II (tabla 3C.2).
Medidas a $\Delta \rightarrow 300$ ns $\square \rightarrow 500$ ns después del disparo del láser.

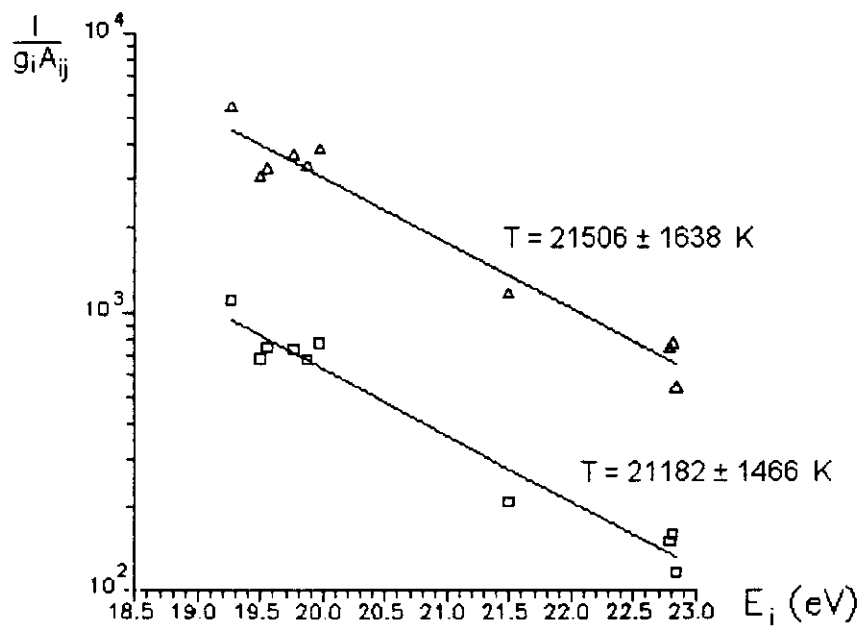


Fig.3C.2. Gráfico de Boltzmann para determinar la temperatura en el plasma utilizando líneas de Ar II (tabla 3C.3).
Medidas a $\Delta \rightarrow 300$ ns $\square \rightarrow 500$ ns después del disparo del láser.

Como se puede comprobar la temperatura obtenida con las líneas de Ar II es perfectamente compatible con las de S II dentro de los errores experimentales, lo cual indica que el plasma que se genera por la ablación de la muestra y el que se forma en el gas de llenado están ambos totalmente termalizados por la alta densidad de electrones que se generan.

Ley de Saha

También la ley de Saha permite calcular la temperatura a la que se encuentra el plasma. Haremos uso de la expresión dada por Griem^{3C.6}.

$$\frac{N_e I_{ik}^z}{I_{jl}^{z-1}} = \frac{2g_i^z A_{ik}^z}{g_j^{z-1} A_{jl}^{z-1}} \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\chi + E_j^{z-1} - E_i^z / kT}$$

Necesitamos determinar la intensidad relativa de dos líneas de especies de grado de ionización consecutivo con probabilidad de transición conocida. Se han escogido las líneas de S II y S III que se presentan en la tabla 3C.4.

Ion	λ (Å)	g	A (10 ⁸ s) NBS ^{3C.11}	E (cm ⁻¹)
S III	4253.6	7	1.2	170649
	4285.0	5	0.9	170067
S II	4267.8	6	1.2	153283
	4269.7	4	0.7	153202
	4294.4	8	1.7	153414
	4318.6	6	0.49	153283
Ar III	3336.1	9	2.0	226646
	3285.9	7	2.0	204797
Ar II	3350.9	6	1.5	200235

Tabla 3C.4. Líneas de azufre y argón escogidas para determinar la temperatura mediante la ley de Saha.

Todas estas líneas, de azufre por un lado y argón por otro, presentan la ventaja de encontrarse en una misma exposición, pudiéndose analizar simultáneamente. Necesitamos asimismo conocer la densidad de electrones. En este caso, como se verá en el apartado siguiente (tabla 3C.6) y los potenciales de ionización del S II y Ar II:

$$\chi(\text{S II}) = 188795 \text{ cm}^{-1}$$

$$\chi(\text{Ar II}) = 222848 \text{ cm}^{-1}$$

	<i>S II/S III</i>	<i>Ar II/Ar III</i>
300 ns	21780 ± 258 K	22720 ± 220 K
500 ns	19310 ± 145 K	

Estos resultados son compatibles con los obtenidos utilizando los diagramas de Boltzmann. Esta concordancia nos permite confirmar por un lado el valor que hemos dado para la temperatura, y por otro que la ley de Saha es utilizable en las presentes condiciones experimentales de medida, de tal manera que se puede emplear para determinar las densidades absolutas de los iones dentro del plasma.

C2.3 Medida de la densidad de electrones

Para la medición de la densidad de electrones que se encuentra en el plasma hemos recurrido a la determinación de la anchura Stark de algunas líneas. La anchura Stark es determinada por el ajuste del perfil experimental a un perfil de Voigt, del cual hay que deconvolucionar la parte instrumental (Secc.B2.cap.1), obteniendo así la parte debida a la radiación que suponemos lorentziana pura porque es debida solamente a ensanchamiento Stark^(*).

Teóricamente la anchura Stark viene dada por la siguiente expresión Griem^{3C.7}:

$$W_{FWHM} = N_e w_\lambda(T) \approx w_\lambda N_e T^{-1/2} \quad (3.12)$$

Hemos de comprobar si se cumple la dependencia de la anchura Stark con la temperatura dada por esta relación teórica para las líneas que vamos a utilizar de S II, y así dar un valor de la densidad de electrones.

En un principio se ha supuesto una dependencia $w_\lambda(T) = AT^b$. Usando los ensanchamientos experimentales para las líneas de 5453.8 Å y 5473.6 Å de S II, dados por Kobilarov^{3C.8} para varias temperaturas, se ha determinado el parámetro $b = -0.43 \approx -0.5$. Se ha considerado entonces que estas líneas cumplen esta dependencia funcional teórica (3.12).

Tomándose la línea de 5436.6 Å de S II como patrón se ha representado el ensanchamiento Stark de ésta con respecto a los de las líneas de 5428.6 Å, 5432.8 Å, 5473.6 Å, 5420.7 Å y 5345.7 Å, todas ellas también de S II, en distintas condiciones experimentales (temperatura y densidad de electrones), variando la presión de argón (fig.3C.4). Al obtener una línea recta podemos asegurar que la dependencia funcional del ensanchamiento Stark con la temperatura es en todas estas líneas el mismo que el de la línea que se ha tomado como patrón. Esto era esperable porque todas estas líneas provienen de una transición $4p \rightarrow 4s$. Se ha utilizado, por tanto, el ensanchamiento medido de todas estas líneas para determinar la densidad electrónica en el plasma.

(*) El ensanchamiento Doppler es totalmente despreciable en los plasmas producidos por láser sobre muestras sólidas, porque apenas hay dispersión de velocidades en el vuelo de las distintas especies iónicas ya que tienden a salir perpendiculares a la muestra.

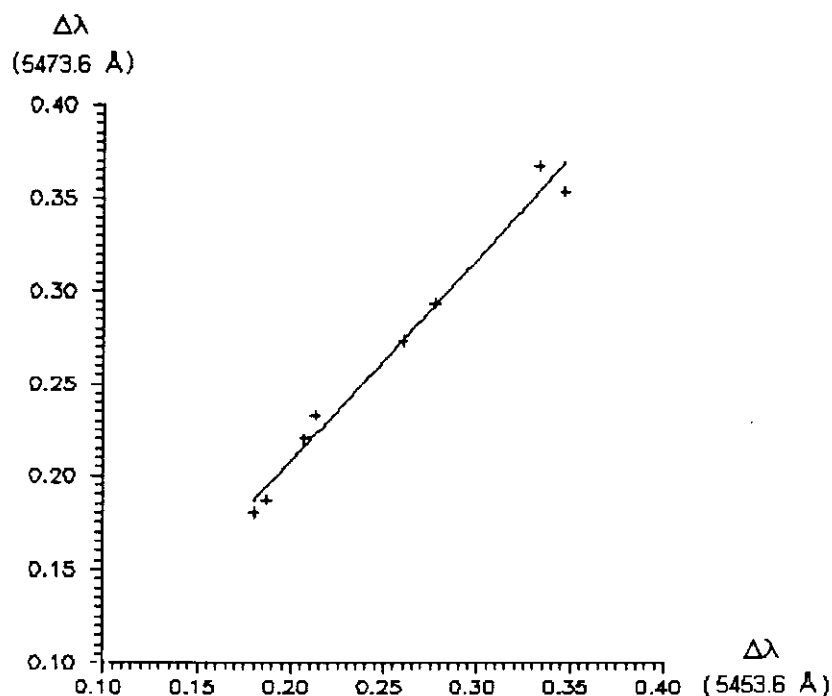


Fig.3C.4. Variación de la anchura Stark de la línea de 5473.3 Å de S II, con respecto a la línea de 5453.6 Å de S II.

Habiendo validado (3.12) para las líneas 5320.7 Å, 5345.7 Å, 5428.6 Å, 5432.8 Å, 5453.8 Å y 5473.6 Å de S II, se ha podido determinar la densidad de electrones de la siguiente manera:

$$N_e = \frac{W_{FWHM} T^{1/2}}{w_\lambda}$$

Donde la anchura a media altura W , la determinamos experimentalmente deconvolucionando el perfil instrumental para cada línea, la temperatura la determinamos según un diagrama de Boltzmann (ec.1.21) y el parámetro de ensanchamiento w_λ está dado por Kobilarov^{3C.8} para la línea de 5453.8 Å que se ha utilizado como patrón. Según las fig.3C.4 el parámetro de ensanchamiento está relacionado con el de esta línea patrón según la siguiente relación lineal.

$$w_{\lambda'} = m w_{\lambda=5453.8 \text{ Å}} = m 7.51 \cdot 10^{-16} \text{ Å cm}^3 K^{1/2}$$

λ (Å)	m
5428.6	1.07
5432.8	1.00
5473.6	1.14
5320.7	1.33
5345.7	1.32

Tabla 3C.5. Relación lineal del ensanchamiento con respecto a la línea de 5453.8 Å de S II.

Las densidades de electrones que se obtienen a partir de la medida del ensanchamiento de las líneas de la tabla 3C.5, se presentan a continuación para distintos tiempos desde el disparo de láser, tabla 3C.6.

Δt (ns)	N_e (10^{16} cm^{-3})
300	8.30 ± 0.62
500	6.47 ± 0.54

Tabla 3C.6. Densidades de electrones a distintos tiempos desde el disparo del láser.

C2.4 Medida de las densidades de iones

En nuestro plasma coexisten varias especies iónicas de tres elementos diferentes, S y Zn por parte de la muestra y Ar por parte del gas de llenado. Para establecer la densidad absoluta de cada una de las especies de estos tres elementos recurrimos a la ley de Saha de la cual hemos comprobado su validez anteriormente, pues ofrece la misma temperatura que los gráficos de Boltzmann.

En primer lugar se puede determinar la proporción de densidades de dos iones consecutivos de un mismo elemento con la ley de Saha, Griem^{3C.6}:

$$\frac{N_e N^Z}{N^{Z-1}} = 2 \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{Z^Z(T)}{Z^{Z-1}(T)} e^{-\chi/kT} = 4.83 \cdot 10^{21} T^{3/2} \frac{Z^Z(T)}{Z^{Z-1}(T)} e^{-1.16 \cdot 10^4 \chi/T}$$

$\chi \rightarrow \text{eV} \quad N \rightarrow m^{-3} \quad T \rightarrow K$

Anteriormente ha sido determinada la temperatura mediante los gráficos de Boltzmann. Para cada temperatura también ha sido determinada la densidad de electrones (tabla 3C.6). Conociendo los niveles de energía de dos iones consecutivos se pueden hallar entonces las funciones de partición de los mismos para las temperaturas correspondientes. Sabiendo además el límite de ionización χ de la especie menos ionizada podemos determinar mediante la ley de Saha la densidad relativa de dos iones consecutivos en grado de ionización, según se muestra en la tabla 3C.7.

Δt (ns)	N^{SII} / N^{SI}	N^{SIII} / N^{SII}	N^{SIV} / N^{SIII}
300	$4.06 \cdot 10^2$	$5.71 \cdot 10^{-1}$	$4.05 \cdot 10^{-4}$
500	$3.57 \cdot 10^2$	$3.63 \cdot 10^{-1}$	$1.85 \cdot 10^{-4}$

Δt (ns)	N^{ZnII} / N^{ZnI}	N^{ZnIII} / N^{ZnII}	N^{ZnIV} / N^{ZnIII}
300	$5.15 \cdot 10^2$	3.90	$4.48 \cdot 10^{-4}$
500	$5.32 \cdot 10^2$	2.86	$1.80 \cdot 10^{-4}$

Δt (ns)	N^{ArII} / N^{ArI}	N^{ArIII} / N^{ArII}
300	$2.11 \cdot 10^2$	$1.33 \cdot 10^{-1}$
500	$1.89 \cdot 10^2$	$8.66 \cdot 10^{-2}$

Tabla 5B.7. Densidades iónicas relativas de iones consecutivos.

Ahora bien, a la densidad de electrones contribuyen cada especie ionizada con un número de electrones que depende del grado de ionización, de tal manera que en nuestro caso podemos establecer la siguiente ecuación.

$$N_e = N^{S II} + 2N^{S III} + 3N^{S VI} + N^{Zn II} + 2N^{Zn III} + 3N^{Zn VI} + N^{Ar II} + 2N^{Ar III} =$$

$$= N^{S II} \left(1 + 2 \frac{N^{S III}}{N^{S II}} + 3 \frac{N^{S IV}}{N^{S III}} \frac{N^{S III}}{N^{S II}} \right) + N^{Zn II} \left(1 + 2 \frac{N^{Zn III}}{N^{Zn II}} + 3 \frac{N^{Zn IV}}{N^{Zn III}} \frac{N^{Zn III}}{N^{Zn II}} \right) + N^{Ar II} \left(1 + 2 \frac{N^{Ar III}}{N^{Ar II}} \right)$$

Aplicando las relaciones de la tabla 3C.7 obtenemos:

$$\text{A } 300 \text{ ns} \rightarrow N_e = 2.14 N^{S II} + 8.80 N^{Zn II} + 1.26 N^{Ar II}$$

$$\text{A } 500 \text{ ns} \rightarrow N_e = 1.72 N^{S II} + 6.72 N^{Zn II} + 1.17 N^{Ar II}$$

Relacionando ahora medidas de intensidades de líneas de S II, Zn II y Ar II podemos deducir las densidades relativas entre estos iones. Según (ec.1.19):

$$I_{ij}^z = \frac{A_{ij}^z}{4\pi} D N^z \frac{g_i^z}{Z^z(T)} e^{-E_i^z/kT}$$

De tal modo que:

$$\frac{I_{ij}^z}{I_{kl}^{z'}} = \frac{A_{ij}^z}{A_{kl}^{z'}} \frac{N^z}{N^{z'}} \frac{g_i^z}{g_k^{z'}} \frac{Z^{z'}(T)}{Z^z(T)} e^{-E_i^z + E_k^{z'}/kT}$$

Se han escogido las líneas de 4991.9 Å de S II, 4965.1 Å de Ar II y la 4911.6 Å de Zn II, cuyas probabilidades de transición son conocidas, Wiese^{3C.10}. Obsérvese que todas estas líneas son detectadas en una misma exposición, por lo que las condiciones experimentales de las tres son las mismas. Al mismo tiempo se encuentran en longitudes de onda próximas unas de otras, no teniéndose una variación en la eficiencia del monocromador significativa. Resulta por tanto:

Δt (ns)	$N^{S II} / N^{Ar II}$	$N^{S II} / N^{Zn II}$
300	0.415	3.53
500	0.79	2.56

Estos valores los podemos sustituir en la ecuación anterior resultando:

$$\text{A } 300 \text{ ns} \rightarrow N_e = N^{S II} \left(2.14 + 8.80 \frac{N^{Zn II}}{N^{S II}} + 1.26 \frac{N^{Ar II}}{N^{S II}} \right) = 7.67 N^{S II}$$

$$N^{S II} = 1.08 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

$$\text{A } 500 \text{ ns} \rightarrow N_e = N^{S II} \left(1.72 + 6.72 \frac{N^{Zn II}}{N^{S II}} + 1.17 \frac{N^{Ar II}}{N^{S II}} \right) = 5.83 N^{S II}$$

$$N^{S II} = 1.11 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

A partir de estos valores se puede determinar las densidades de las demás especies iónicas a los tiempos de 300 y 500 ns después del impulso láser, según se muestra en la tabla 3C.8.

$N \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	300 ns	500 ns
$N^{S I}$	$2.5 \cdot 10^{13}$	$3.1 \cdot 10^{13}$
$N^{S II}$	$1.1 \cdot 10^{16}$	$1.1 \cdot 10^{16}$
$N^{S III}$	$6.2 \cdot 10^{15}$	$4.0 \cdot 10^{15}$
$N^{S IV}$	$2.5 \cdot 10^{12}$	$7.4 \cdot 10^{11}$
$N^{Zn I}$	$6.0 \cdot 10^{12}$	$8.1 \cdot 10^{12}$
$N^{Zn II}$	$3.1 \cdot 10^{15}$	$4.3 \cdot 10^{15}$
$N^{Zn III}$	$1.2 \cdot 10^{16}$	$1.2 \cdot 10^{16}$
$N^{Zn IV}$	$5.4 \cdot 10^{12}$	$2.1 \cdot 10^{12}$
$N^{Ar I}$	$1.3 \cdot 10^{14}$	$7.4 \cdot 10^{13}$
$N^{Ar II}$	$2.7 \cdot 10^{16}$	$1.4 \cdot 10^{16}$
$N^{Ar III}$	$3.5 \cdot 10^{15}$	$1.2 \cdot 10^{15}$

Tabla 3C.8. Densidades absolutas de las especies iónicas que coexisten en el plasma.

C2.5 Probabilidades de transición

Los resultados experimentales obtenidos se presentan en la tabla 3C.11, en donde también se presentan las probabilidades de transición que se han calculado, haciendo uso del código de Cowan^{3A.3} que utiliza un algoritmo iterativo de Hartree-Fock. Todos estos resultados se comparan con nuestros resultados experimentales y con los resultados teóricos y experimentales de otros autores.

Como puede observarse existe un buen acuerdo entre los resultados experimentales obtenidos utilizando el método de la regla de la suma y el de la temperatura del plasma, y los calculados teóricamente. Estos resultados se comparan con la bibliografía existente, tanto con resultados experimentales, Miller^{3C.9}, Wiese^{3C.13}; como con los resultados de Aymar^{3C.12}, habiendo en ambos casos un buen acuerdo.

Transición	Longitud de Onda $\lambda(\text{\AA})$	PROBABILIDAD DE TRANSICIÓN ABSOLUTA (10^7 s^{-1})					
		Este trabajo			Otros autores		
		Experimental		Teórico	Experimental		Teórico
		(1)	(2)		Miller ^{3C.9}	Wiese ^{3C.13}	Aymar ^{3C.12}
$4p \ ^4D_{7/2} \rightarrow 4s \ ^4P_{3/2}$	5453.82	9.7*	9.7*	9.70	10.1A ^a	10.0	8.5
$4p \ ^4D_{7/2} \rightarrow 3d \ ^4F_{7/2}$	5526.25	0.4	0.42	0.42	0.9C		0.6
$\quad \quad \quad ^4F_{9/2}$	5606.15	4.0	4.02	4.10	3.8A	4.0	5.4
$\quad \quad \quad ^4F_{5/2}$	5467.22			0.002			0.03
$\quad \quad \quad ^4D_{5/2}$	6957.93	< 0.15		0.07			0.08
$\quad \quad \quad ^4D_{7/2}$	6981.40	0.5		0.43			0.48
$4p \ ^4D_{5/2} \rightarrow 4s \ ^4P_{3/2}$	5432.81	7.0	7.6	7.60	7.7A	7.8	6.8
$\quad \quad \quad ^4P_{3/2}$	5564.98	1.9	2.1	1.7	2.0A	2.0	1.7
$4p \ ^4D_{5/2} \rightarrow 3d \ ^4F_{3/2}$	5536.72	0.04	0.04	0.04	1.0D		0.06
$\quad \quad \quad ^4F_{5/2}$	5578.89	0.83	0.90	0.82	1.1C		1.1
$\quad \quad \quad ^4F_{7/2}$	5640.33	4.44	4.8	3.80	4.9E		4.8
$\quad \quad \quad ^4D_{3/2}$	7124.28			0.093			0.11
$\quad \quad \quad ^4D_{5/2}$	7139.81			0.23			0.23
$\quad \quad \quad ^4D_{7/2}$	7164.49			0.12			0.2
$4p \ ^4D_{3/2} \rightarrow 4s \ ^4P_{1/2}$	5428.67	4.2	4.5	4.80	5.5A	5.0	4.2
$\quad \quad \quad ^4P_{3/2}$	5509.72	4.2	4.4	4.50	4.2A	4.6	4.0
$\quad \quad \quad ^4P_{5/2}$	5645.67	0.4	0.45	0.32	1.9E		0.22
$4p \ ^4D_{3/2} \rightarrow 3d \ ^4F_{3/2}$	5616.64	0.74	0.79	0.89	1.8E		1.2
$\quad \quad \quad ^4F_{5/2}$	5659.99	3.14	3.32	3.60	4.4A	4.3	4.6
$4p \ ^4D_{1/2} \rightarrow 4s \ ^4P_{1/2}$	5473.62	7.7	8.1	8.20	8.4A	7.3	7.3
$\quad \quad \quad ^4P_{3/2}$	5556.01	1.1	1.2	1.25	2.9B	1.1	1.1
$4p \ ^4D_{1/2} \rightarrow 3d \ ^4F_{3/2}$	5664.78	4.1	4.3	4.57	5.2A	4.8	5.8
$4p \ ^2S_{1/2} \rightarrow 3d \ ^2P_{3/2}$	5027.22	5.1	5.1	5.8	4.6C	3.6	
$\quad \quad \quad ^2P_{1/2}$	5142.34	2.6	2.5	1.9	2.7A		

Tabla 3C.11. Probabilidades de transición de líneas de S II.

(1) → Valores determinados mediante la regla de la suma de fuerzas de línea. Partes radiales calculadas por Hartree-Fock.

(2) → Valores determinados haciendo uso de la temperatura del plasma.

(*) → Obtenido directamente de la regla de la suma y usado para poner en valor absoluto el resto de los valores.

^a 18% ≤ A < 22% 22% ≤ B < 28% 28% ≤ C < 38% 38% ≤ D < 50% E > 50%

C2.6 Verificación de las condiciones experimentales.

Todos los resultados que se han obtenido parten de unas expresiones teóricas que presuponen el plasma en equilibrio termodinámico local y que sea ópticamente delgado. En esta sección vamos a comprobar que nuestras condiciones experimentales cumplen estos dos requisitos.

Una vez que hay equilibrio termodinámico local y los plasmas son ópticamente delgados se justifica el uso de los diagramas de Boltzmann y la ley de Saha.

Equilibrio termodinámico local

Para determinar si estamos en condiciones de equilibrio termodinámico local podemos hacer uso del criterio dado en (1.14):

$$N_e \gg 1.6 \times 10^{12} T^{1/2} (\Delta E)^3 \text{ cm}^{-3}$$

Para las líneas de S II que hemos utilizado, el salto de energías más grande corresponde a $\Delta E = 3.08 \text{ eV}$.

S II A 300 ns \rightarrow T = 21040 K
 $N_e = 8.3 \cdot 10^{16} \gg 6.77 \cdot 10^{15}$

A 500 ns \rightarrow T = 19740 K
 $N_e = 6.5 \cdot 10^{16} \gg 6.57 \cdot 10^{15}$

Como se puede apreciar el criterio se satisface con un orden de magnitud en ambos casos.

Plasmas ópticamente delgados

Para evaluar el coeficiente de autoabsorción podemos hacer uso de (1.22):

$$k_{ji} = g_i \frac{A_{ij}}{4\pi^2 c Z(T)} N e^{-E_j/kT} (1 - e^{-\Delta E/kT}) \frac{\lambda_{ij}^4}{\Delta \lambda_{ij}}$$

Así, evaluando k y estimando el espesor de la fuente D , podremos comprobar si tenemos un plasma ópticamente delgado pues ha de verificarse la condición dada en (1.18):

$$k.D \ll 1$$

Se ha estimado el coeficiente de autoabsorción para la línea de 5453.8 Å de S II, con los siguientes datos determinados anteriormente:

$$\Delta t = 300 \text{ ns} \rightarrow \begin{cases} T = 21040 \text{ K} \\ N^{SII} = 1.08 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} \\ \Delta \lambda = 0.4 \text{ Å} \end{cases}$$

Con lo que se obtiene un coeficiente de autoabsorción:

$$k = 0.52 \text{ cm}^{-1}$$

Se ha estimado una dimensión de la pluma de $D \approx 0.3 \text{ cm}$, con lo que se satisface el criterio de delgadez óptica.

$$k.D = 0.16 \ll 1$$

REFERENCIAS CAPÍTULO 3

Parte A

- 3A.1 A. P. Thorne, *"Spectrophysics"*, cap.9, Chapman and Hall Ltd. (1988).
- 3A.2 R. D. Cowan, *"The Theory of Atomic Structure and Spectra"*, cap.14, University of California Press. Berkeley-Los Ángeles-London (1981).
- 3A.3 R. D. Cowan, *"The Theory of Atomic Structure and Spectra"*, caps.8 y 16, University of California Press. Berkeley-Los Ángeles-London (1981).

Parte B

- 3B.1 R. L. Kelly, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **16**, Suppl. 1 (1987).
- 3B.2 V. Kaufmann y W. C. Martin, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **20**, 775 (1991).
- 3B.3 J. A. Kernahan y cols., *Phys. Scripta*, **19**, 267 (1979).
- 3B.4 B. C. Fawcett, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **34**, 215 (1986).
- 3B.5 E. Biémont, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **48**, 1 (1991).
- 3B.6 M. J. Vilkas, G. Merkelis, R. Kisielius, G. Gaigalas, A. Bernotas, and Z. Rudzikas, *Phys. Scripta*, **49**, 592 (1994).

Parte C

- 3C.1 V. Kaufmann and W. C. Martin, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **22**, 279 (1993).
- 3C.2 F. Yang and A. J. Cunningham, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **49**, 53 (1993).

- 3C.3 Y. K. Ho and R. J. Henry, *Phys. Scripta* **35**, 831 (1987).
- 3C.4 P. C. Ojha and A. Hibbert, *J. Phys. B* **22**, 1153 (1989).
- 3C.5 V. Vujnovic and W. L. Wiese, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **21** n°5, 919 (1992).
- 3C.6 H. R. Griem, *"Plasma Spectroscopy"*. McGraw-Hill. NY. cap.6 (1964).
- 3C.7 H. R. Griem, *Phys. Rev.* **165**, 258 (1968).
- 3C.8 R. Kobilarov and N. Konjevic, *Physical Review A*, **41**, 6023 (1990).
- 3C.9 Myron H. Miller, Thomas D. Wilkerson, Randy A. Roig, Roger D. Bengtson, *Phys. Rev. A*, **9**, 2312 (1974).
- 3C.10 W. L. Wiese and G. A. Martin, *"Wavelengths and Transition Probabilities for Atoms and Atomic Ions. Part II"*, NSRDS-NBS (1980).
- 3C.11 W. L. Wiese, M. W. Smith and B. M. Glennon, *"Atomic Transition Probabilities"*, NBSRS, Vol II (1970).
- 3C.12 M. Aymar, *Physica*, **66**, 364 (1973).
- 3C.13 J. M. Bridges and W. L. Wiese, *Phys. Rev.*, **159**, 31 (1967).
- 3C.14 B. C. Fawcett, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **35**, n°2, 203 (1986).

CONCLUSIONES

CONCLUSIONES

1. Se ha puesto en funcionamiento un sistema experimental para la obtención de plasmas producidos por láser en el margen espectral del ultravioleta de vacío.
2. Se han obtenido con el sistema de ultravioleta de vacío espectros de emisión de aluminio, cerámicas (Al_2O_3 , BN), polietileno (C_2H_2) y blenda (ZnS).
3. Ha sido realizada la calibración en eficiencia en el margen espectral 386-1337 Å de nuestro sistema espectrométrico de ultravioleta de vacío. Para ello se han utilizado el método de las razones de ramificación y la emisión del espectro continuo de un plasma de tungsteno, mostrándose un buen acuerdo entre ambos resultados.
4. Asimismo se presenta un amplio estudio de valores, tanto teóricos como experimentales, de razones de ramificación obtenidas en los últimos 20 años, y que se han utilizado para la calibración en eficiencia en el margen espectral del ultravioleta de vacío.
5. Se han elaborado programas de ordenador para reconstruir la función eficiencia tanto por el método de interpolación-extrapolación lineal como por ajuste a una función dada por mínimos cuadrados. Previamente el ajuste por mínimos cuadrados generalizados ha habido que desarrollarlo de forma teórica.
6. Ha sido determinada las probabilidades absolutas de transición en el margen espectral del ultravioleta de vacío, para multipletes de Al VI y Al VII midiendo intensidades de línea y utilizando el método de la vida media.
7. Utilizando resolución espacial se han obtenido razones de probabilidades de transición de $S II$ en el margen espectral del ultravioleta de vacío, comparándose, cuando ha sido posible, con resultados previos tanto teóricos como experimentales.

8. Haciendo uso de resolución temporal se han determinado probabilidades de transición absolutas de $S //$ en el margen espectral del visible. Para poner en escala absoluta las probabilidades de transición relativas medidas, se han usado los métodos experimentales descritos en el cap.3.
- Regla de la suma cuando ha sido posible calcular las partes radiales por Hartree-Fock.
 - Método de la vida media cuando se ha dispuesto de una vida media experimental fiable por su concordancia con los cálculos teóricos.
 - Método de la temperatura cuando no se han medido todas las transiciones entre dos configuraciones o que parten de un mismo nivel superior.
9. Previamente se han determinado parámetros del plasma en el margen espectral visible, tales como la temperatura, densidad de electrones y de iones para poder asegurar condiciones de equilibrio termodinámico local o de delgadez óptica del plasma.

APÉNDICES

En este apartado de Apéndices se presentan en primer lugar los programas que han sido utilizados para elaborar los resultados que se presentan en esta memoria.

También se presentan las comunicaciones en congresos así como los artículos publicados en revistas científicas.

A. PROGRAMAS REALIZADOS

A1. PROGRAMA COMPAT

Este programa permite la introducción de datos para representar curvas en escala logarítmica normalizada a la unidad, teniendo libertad a la hora de elegir el margen espectral de interés o el número de décadas a representar. Esta facilidad permite dibujar curvas de intensidad aparente de espectros de emisión continua como wolframio o samario. También permite introducir ficheros de datos de razones de eficiencia y representar con ellos parejas de puntos auxiliares (Cfr.Apénd.A2) sobre un espectro de emisión continua. Así se puede apreciar gráficamente el grado de compatibilidad entre ambos métodos de calibración en eficiencia. Cuantitativamente calcula también la razón de correlación entre ambos datos (ec.xx.xx). Incluye un editor para añadir, borrar o corregir datos de los ficheros de las razones de ramificación de eficiencia.

```
10 REM *****
20 REM *** COMPATIBILIDAD DE LAS RAZONES CON EL CONTINUO ***
30 REM ***** Juan Luis González-Santander**
40 CLEAR:DIM X(10),Y(10),R$(10),R(10),RLDO(10,2),YR(10,2),YC(10,2)
50 DIM HORIZONTAL(500),VERTICAL(500)
60 CLS:SCREEN 9:COLOR 7,0:F#=.4342944819#
70 ON ERROR GOTO 3940
80 ON KEY(1) GOSUB 3370:REM ** Define f1 = Editor de razones **
90 ON KEY(2) GOSUB 3160:REM ** Define f2=Invertir colores, para imprimir **
100 ON KEY(3) GOSUB 3250:REM *** Define f3 = malla logarítmica ***
110 ON KEY(4) GOSUB 3880:REM ** Define f4=Desactiva visualización de
teclas *
```

```

120 ON KEY(5) GOSUB 3910:REM *** Define f5 = Activa visualización de
teclas **
130 ON KEY(6) GOSUB 1280:REM ** Define f6 = Imprimir razones **
135 ON KEY(7) GOSUB 5000:REM ** Define f7 = Valores del continuo **
140 KEY (1) ON:KEY (4) ON:KEY (6) ON:KEY (7) ON
150 KEY 1," Edit":KEY 2," Inv.color":KEY 3," Malla"
160 KEY 4,"Desact":KEY 5," Act":KEY 6," Imp.R"
170 KEY 7," Val":KEY 8," ---":KEY 9," ---":KEY 10," —":KEY ON
180 REM ***** MENÚ INICIAL *****
190 LOCATE 3,15:PRINT " COMPATIBILIDAD DEL CONTINUO"
200 LOCATE 4,15:PRINT "CON LAS RAZONES DE RAMIFICACION"
210 LOCATE 8,18:PRINT "1. Introducir datos."
220 LOCATE 10,18:PRINT "2. Leer datos."
230 LOCATE 12,18:PRINT "3. Salvar datos."
240 LOCATE 14,18:PRINT "4. Salir."
250 GOSUB 310
260 LOCATE 19,18:INPUT "Elija opción: ",OP%
270 IF OP%>SS OR OP%<1 THEN GOTO 260
280 ON OP% GOSUB 360,880,1420,3140,1820
290 CLS 1:CLS 2:GOTO 180
300 REM *** Rutina del menú principal ***
310 LOCATE 16,18:SS=4
320 IF NR=0 AND NC<>0 THEN PRINT "5. Gráfico del continuo":SS=5
330 IF NC<>0 AND NR<>0 THEN PRINT "5. Compatibilidad continuo-
razones":SS=5
340 RETURN
350 CLS 1:CLS 2:GOTO 180
360 REM *** RUTINA DE INTRODUCCIÓN DE DATOS ***
370 REM ** Menú de introducción **
380 CLS 1:CLS 2:LOCATE 3,20:PRINT "INTRODUCCION DE DATOS"
390 LOCATE 7,18:PRINT "1. Datos del continuo."
400 LOCATE 9,18:PRINT "2. Datos de las razones."
410 LOCATE 12,18:INPUT "Elija opción: ",OP%
420 IF OP%>2 OR OP%<1 THEN GOTO 410
430 ON OP% GOTO 440,690
440 REM ** Datos del continuo **
450 CLS 1:CLS 2
460 LOCATE 2,11:PRINT "INTRODUCCIÓN DATOS DEL CONTINUO"

```

```

470 LOCATE 7,1:INPUT "Nombre del continuo";NOMCONT$:PRINT
480 PRINT "Rango de longitudes de onda en ";CHR$(143);" (inicial,final)?";
490 INPUT " ",LDOI,LDOF
500 PRINT:INPUT "Número de datos";NC
510 ERASE X,Y:DIM X(NC),Y(NC):DELTA=(LDOF-LDOI)/(NC-1)
520 VIEW PRINT 5 TO 22:CLS 2
530 FOR I=1 TO NC
540 X(I)=LDOI+(I-1)*DELTA
550 PRINT "x(";I;")=";X(I);PRINT "y(";I;")=";:INPUT " ",Y(I)
560 PRINT
570 NEXT I
580 VIEW PRINT
590 REM ** Normalización de datos **
600 MAX=0
610 FOR I=1 TO NC
620 VIEW PRINT
630 IF Y(I)>MAX THEN MAX=Y(I)
640 NEXT I
650 FOR I=1 TO NC
660 Y(I)=Y(I)/MAX
670 NEXT I
680 RETURN
690 REM ** Datos de las razones **
700 LOCATE 3,12:PRINT "INTRODUCCION DATOS RAZONES"
710 CLS 1:CLS 2:PRINT:PRINT
720 PRINT " Introduzca cada razón con de este formato:"
730 PRINT:PRINT " L.d.o.1/L.d.o.2=razón"
740 PRINT:PRINT " NOTA: Longitudes de onda en ";CHR$(143)
750 PRINT:PRINT
760 INPUT " Nombre de las razones";NOMRAZON$
770 PRINT:INPUT " Cuántas razones va a introducir";NR
780 ERASE R$:DIM R$(NR+10)
790 CLS 1:CLS 2
800 LOCATE 1,5:PRINT "INTRODUCCIÓN DE LAS RAZONES":PRINT
810 VIEW PRINT 3 TO 22
820 FOR I=1 TO NR
830 PRINT "Razón nº";I:LINE INPUT R$(I)
840 PRINT

```

```

850 NEXT I
860 VIEW PRINT
870 RETURN
880 REM *** LEER DATOS **
890 CLS 1:CLS 2:LOCATE 3,22:PRINT "LECTURA DE DATOS"
900 LOCATE 7,18:PRINT "1. Datos del continuo."
910 LOCATE 9,18:PRINT "2. Datos de las razones."
920 LOCATE 12,18:INPUT "Elija opción: ",OP%
930 IF OP%>2 OR OP%<1 THEN GOTO 920
940 ON OP% GOTO 950,1070
950 REM ** Lectura datos continuo **
960 CLS 1:CLS 2:LOCATE 1,10:PRINT "LECTURA DATOS DEL CONTINUO"
970 PRINT:SHELL "dir/w *.con"
980 LOCATE 20,1:INPUT "Nombre del archivo";NOMCONT$
990 OPEN "I",#1,NOMCONT$
1000 NOMCONT$=LEFT$(NOMCONT$,LEN(NOMCONT$)-4)
1010 INPUT #1,NC:ERASE X,Y:DIM X(NC),Y(NC)
1020 FOR I=1 TO NC
1030 INPUT #1,X(I),Y(I)
1040 NEXT I
1050 CLOSE #1
1060 RETURN
1070 REM *** Lectura datos razones ***
1080 CLS 1:CLS 2:LOCATE 1,15:PRINT "LECTURA DE RAZONES"
1090 LOCATE 3,5:PRINT "Los archivos de razones disponibles son:"
1100 SHELL "dir/w *.raz"
1110 LOCATE 18,1:INPUT "Nombre del archivo";NOMRAZON$
1120 OPEN "I",#1,NOMRAZON$
1130 NOMRAZON$=LEFT$(NOMRAZON$,LEN(NOMRAZON$)-4)
1140 INPUT #1,NR
1150 ERASE R$:DIM R$(NR+10)
1160 FOR I=1 TO NR
1170 INPUT #1,R$(I)
1180 NEXT I
1190 CLOSE #1
1200 CLS 1:CLS 2:PRINT
1210 FLAG=1:GOSUB 1300:REM ** Impresión de razones **
1220 PRINT:PRINT "    1. Otras razones."

```

```

1230 PRINT "    2. Continuar."
1240 PRINT:INPUT "    Elija opción: ",OP%
1250 IF OP%=1 THEN GOTO 1070
1260 IF OP%=2 THEN RETURN
1270 GOTO 1200
1280 REM *** IMPRESIÓN DE RAZONES ***
1290 PCOPY 0,1
1300 CLS 1:CLS 2
1310 IF NR=0 THEN NOMRAZON$="no"
1320 PRINT " El archivo ";NOMRAZON$;" contiene las razones:":PRINT
1330 FOR I=1 TO NR
1340 PRINT " Razón nº";I;" ";R$(I)
1350 NEXT I
1360 KEY (2) ON
1370 WHILE INKEY$=""
1380 WEND
1390 KEY (2) OFF
1400 IF FLAG=1 THEN FLAG=0 ELSE PCOPY 1,0
1410 RETURN
1420 REM *** SALVAR DATOS ***
1430 CLS:LOCATE 3,15:PRINT "SALVAR DATOS"
1440 LOCATE 6,12:PRINT "1. Salvar razones."
1450 LOCATE 8,12:PRINT "2. Salvar continuo."
1460 LOCATE 10,12:PRINT "3. Salvar todo."
1470 LOCATE 13,12:INPUT "Elija opción: ",OP%
1480 IF OP%<1 OR OP%>3 THEN GOTO 1470
1490 ON OP% GOTO 1500,1650,1790
1500 REM *** Salvar razones ***
1510 CLS:NOM$=""
1520 LOCATE 1,6:PRINT "SALVAR RAZONES"
1530 LOCATE 6,2:PRINT " Enter = nombre actual: ";NOMRAZON$
1540 LOCATE 4,2:INPUT " Nombre del archivo: ",NOM$
1550 IF NOM$<>"" THEN NOMRAZON$=NOM$
1560 NOMRAZ$=LEFT$(NOMRAZON$,8)+".raz"
1570 OPEN "o",#1,NOMRAZ$
1580 WRITE #1,NR
1590 FOR I=1 TO NR
1600 WRITE #1,R$(I)

```

```

1610 NEXT I
1620 CLOSE #1
1630 CLS
1640 RETURN
1650 REM *** Salvar continuo ***
1660 CLS:NOM$=""
1670 LOCATE 1,6:PRINT "SALVAR CONTINUO"
1680 LOCATE 6,2:PRINT " Enter = nombre actual: ";NOMCONT$
1690 LOCATE 4,2:INPUT " Nombre del archivo: ",NOM$
1700 IF NOM$ <>"" THEN NOMCONT$=NOM$
1710 NOMCON$=LEFT$(NOMCONT$,8)+".con"
1720 OPEN "o",#1,NOMCONT$
1730 WRITE #1,NC
1740 FOR I=1 TO NC
1750 WRITE #1,X(I),Y(I)
1760 NEXT I
1770 CLOSE #1
1780 RETURN
1790 REM *** Salvar todo ***
1800 GOSUB 1500:GOSUB 1650
1810 RETURN
1820 REM *** COMPATIBILIDAD CONTINUO-RAZONES ***
1830 ERASE RLDO,R:DIM RLDO(NR,2),R(NR)
1840 REM *** Interpretación de las razones ***
1850 DEF FNPART(I,X,Y)=VAL(MID$(R$(I),X+1,Y-X-1))
1860 FOR I=1 TO NR
1870 S1=0:S2=0:S3=0
1880 S1=INSTR(R$(I),"/")
1890 S2=INSTR(R$(I), "=")
1900 S3=LEN(R$(I))+1
1910 RLDO(I,1)=FNPART(I,0,S1)
1920 RLDO(I,2)=FNPART(I,S1,S2)
1930 R(I)=FNPART(I,S2,S3)
1940 NEXT I
1950 REM *** Definición de la función poligonal del continuo ***
1955 GOSUB 4500
1990 ERASE YR,YC:DIM YR(NR,2),YC(NR,2)
2000 REM ** Cálculo de los puntos auxiliares sobre el continuo **

```

```

2010 FOR I=1 TO NR
2020 X=RLDO(I,2):GOSUB 3200
2030 IF Z=-1 THEN GOTO 2080 ELSE YC(I,2)=Z:REM *Test si razones
montan continuo*
2040 X=RLDO(I,1):GOSUB 3200
2050 IF Z=-1 THEN GOTO 2080 ELSE YC(I,1)=Z
2060 YR(I,2)=(YC(I,2)+R(I)*YC(I,1))/(1+R(I)^2)
2070 YR(I,1)=R(I)*YR(I,2)
2080 NEXT I
2090 IF NR=0 THEN GOTO 2260
2100 REM ** Razón de correlación continuo-razones **
2110 J=1
2120 IF YC(J,1)=0 OR YC(J,2)=0 THEN J=J+1:GOTO 2120:REM *Comienzo
solapamiento*
2130 RMEDIA=0:I=J
2140 WHILE YC(I,1)<>0 AND YC(I,2)<>0
2150 RMEDIA=RMEDIA+R(I)
2160 I=I+1
2170 WEND
2180 RMEDIA=RMEDIA/(I-1-J)
2190 RES=0:SIGMA=0:I=J
2200 WHILE YC(I,1)<>0 AND YC(I,2)<>0
2210 RES=RES+((R(I)-YC(I,1)/YC(I,2))/R(I))^2
2220 SIGMA=SIGMA+((R(I)-RMEDIA)/R(I))^2
2230 I=I+1
2240 WEND
2250 R=SQR(1-RES/SIGMA)
2260 REM ** REPRESENTACION GRÁFICA **
2270 REM
2280 REM ** ELECCIÓN DE ESCALA **
2290 CLS 1:CLS 2
2300 LOCATE 3,25:PRINT "ELECCIÓN DE ESCALA"
2310 LOCATE 5,20:PRINT "1. Elección automática"
2320 LOCATE 7,20:PRINT "2. Elección manual"
2330 LOCATE 9,20:INPUT "Elija opción: ",OP
2340 ON OP GOSUB 2360,2420
2350 GOTO 2580
2360 X1=INT(X(1)/50)*50:XN=INT(X(NC)/50+1)*50

```

```

2370 EFMIN1=Y(1):EFMIN2=Y(NC)
2380 IF EFMIN1>EFMIN2 THEN EFMIN=EFMIN2 ELSE EFMIN=EFMIN1
2390 IF EFMIN>.1 THEN NDEC=1:GOTO 2410
2400 IF EFMIN<.1 AND EFMIN>.01 THEN NDEC=2 ELSE NDEC=3
2410 RETURN
2420 X1I=X1:XNI=XN:LOCATE 22,10:PRINT "Enter = Última elección"
2430 LOCATE 13,4:PRINT "EJE DE ABSCISAS en ";CHR$(143)
2440 LOCATE 15,1:PRINT "Margen izquierdo:";X1;CHR$(143)
2450 PRINT "Margen derecho:";XN;CHR$(143)
2460 PRINT:INPUT "Introduzca margen izquierdo:";X1
2470 IF X1=0 THEN X1=X1I
2480 INPUT "Introduzca margen derecho:";XN
2490 IF XN=0 THEN XN=XNI
2500 NDECI=NDEC
2510 LOCATE 13,34:PRINT "EJE DE ORDENADAS (escala logarítmica)"
2520 LOCATE 15,32:PRINT "Número de décadas:";NDEC
2530 LOCATE 16,32:INPUT "Introduzca nº de décadas (1-3): ";NDEC
2540 NDEC=INT(NDEC)
2550 IF NDEC=0 THEN NDEC=NDECI
2560 IF NDEC>3 OR NDEC<1 THEN GOTO 2530
2570 CLS:RETURN
2580 REM * Nombre del archivo **
2590 CLS 1:CLS 2
2600 LOCATE 1,5:PRINT "Razones: ";NOMRAZON$,"Continuo:
";NOMCONT$,"r =";R
2610 REM ** Eje ordenadas **
2620 LOCATE 2,2:PRINT "1"
2630 IF NDEC=2 THEN LOCATE 12,1:PRINT ".1"
2640 IF NDEC=3 THEN LOCATE 9,1:PRINT ".1":LOCATE 15,1:PRINT ".01"
2650 REM ** Eje abscisas **
2660 RECX=ABS(X1-XN):HX=INT(RECX/200+.5)*50
2670 IF RECX/HX>4 THEN S=7.5:RS=S-.6:SS=8 ELSE S=15:RS=S-4:SS=14
2680 NUM=-1:XNUM=0
2690 WHILE XNUM<XN
2700 NUM=NUM+1
2710 XNUM=X1+HX*NUM
2720 LOCATE 23,INT(RS*NUM)+SS:PRINT XNUM
2730 WEND

```



```

2740 LOCATE 23,INT(RS*NUM)+SS+12:PRINT CHR$(143)
2750 NCANAL=8*S*NUM
2760 ACH#=ABS(X1-XNUM)/NCANAL:REM * Angstrom por canal *
2770 QX=HX/40
2780 DEF FNCY#(X)=1+(F#*LOG(X))/NDEC
2790 VIEW (25,6)-(95+NCANAL,300)
2800 WINDOW (X1-HX,0)-(XNUM+HX,1.05)
2810 REM *** Define las matrices de la malla logarítmica ***
2820 LINE (XNUM+HX,0)-(X1-HX+2*QX,0),,,&HCCCC
2830 GET (XNUM+HX,0)-(X1-HX+2*QX,0),HORIZONTAL
2840 LINE (X1-HX,1/60)-(X1-HX,1),,,&HCCCC
2850 GET (X1-HX,1/60)-(X1-HX,1),VERTICAL
2860 REM *** Pinta los ejes ***
2870 LINE (XNUM+HX,0)-(X1-HX,0)
2880 LINE -(X1-HX,1)
2890 FOR XRAYA=0 TO 9
2900 XR=X1+HX*XRAYA
2910 LINE (XR,0)-(XR,1/60)
2920 NEXT XRAYA
2930 FOR DEC=1 TO NDEC
2940 FOR YRAYA=1 TO 10
2950 YR=FNCY#(YRAYA*10^(-DEC)):LINE (X1-HX,YR)-(X1-HX+2*QX,YR)
2960 NEXT YRAYA,DEC
2970 REM *** Pinta los puntos del continuo ***
2980 PSET (X(1),FNCY#(Y(1))),3
2990 FOR I=1 TO NC
3000 LINE -(X(I),FNCY#(Y(I))),3
3010 NEXT I
3020 REM *** Pinta los puntos de las razones ***
3030 FOR I=1 TO NR
3040 FOR L=1 TO 2
3050 IF YR(I,L)=0 THEN GOTO 3090
3060 XP=RLDO(I,L):YP#=FNCY#(YR(I,L))
3070 LINE (XP-QX,YP#-1/80)-(XP+QX,YP#+1/80),2
3080 LINE (XP-QX,YP#+1/80)-(XP+QX,YP#-1/80),2
3090 NEXT L,I
3100 KEY (2) ON:KEY (3) ON
3110 WHILE INKEY$="":WEND

```

```

3120 KEY (2) OFF:KEY (3) OFF
3130 CLS 1:CLS 2:RETURN
3140 REM *** SALIR ***
3150 SYSTEM
3160 REM ** Inversión de colores de pantalla con F2 ***
3170 INV=INV+1
3180 IF INV MOD 2 = 1 THEN PALETTE 7,0:COLOR 7,63 ELSE PALETTE
7,7:COLOR 7,0
3190 RETURN
3200 REM *** Rutina del cálculo de valores en la poligonal del continuo **
3210 IND=FNINDEX(X)
3220 IF IND>NC-1 OR IND <1 THEN Z=-1:GOTO 3240
3230 Z=FNINTERPOL(X)
3240 RETURN
3250 REM *** Pinta la malla del papel logarítmico con F3 ***
3260 REM ** Malla horizontal **
3270 FOR DEC=1 TO NDEC
3280 FOR MALLA=2 TO 10
3290 YMALLA=FNCY#(MALLA*10^(-DEC)):PUT (X1-
HX+2*QX,YMALLA),HORIZONTAL
3300 NEXT MALLA,DEC
3310 REM ** Malla vertical **
3320 FIN=(XNUM-X1)/HX+1
3330 FOR MALLA=0 TO FIN
3340 XMALLA=X1+HX*MALLA:PUT (XMALLA,1/60),VERTICAL
3350 NEXT MALLA
3360 RETURN
3370 REM ***** EDITOR DE RAZONES *****
3380 PCOPY 0,1
3390 CLS 1:CLS 2
3400 IF NR=0 THEN GOTO 3820
3410 LOCATE 1,30:PRINT "EDITOR DE RAZONES"
3420 REM ** Impresión de razones y menú **
3430 FOR I=1 TO NR
3440 IF I>12 THEN POSX=1:POSY=1 ELSE POSX=0:POSY=0
3450 LOCATE 2+I-POSX*12,4+40*POSY:PRINT I;". ";R$(I)
3460 NEXT I
3470 LOCATE 17,12:PRINT "MENU."

```

```

3480 LOCATE 19,6:PRINT "1. Borrar razón."
3490 LOCATE 20,6:PRINT "2. Añadir razón."
3500 LOCATE 21,6:PRINT "3. Corregir razón."
3510 LOCATE 22,6:PRINT "4. Fin."
3520 LOCATE 23,6:INPUT "Elija opción: ",OPCION%
3530 IF OPCION%>4 OR OPCION%<1 THEN GOTO 3520
3540 ON OPCION% GOTO 3550,3630,3720,3790
3550 REM ** Borrar razón **
3560 LOCATE 20,36:INPUT "Borrar razón nº: ",NB
3570 NR=NR-1
3580 FOR I=NB TO NR
3590 R$(I)=R$(I+1)
3600 NEXT I
3610 R$(NR+1)=" "
3620 GOTO 3390
3630 REM ** Añadir Razón **
3640 NR=NR+1
3650 LOCATE 20,36:INPUT "Posición nº: ",NA
3660 FOR I=NR TO NA+1 STEP -1
3670 R$(I)=R$(I-1)
3680 NEXT I
3690 LOCATE 21,36:PRINT "Razón nº";NA
3700 LOCATE 22,36:LINE INPUT R$(NA)
3710 GOTO 3390
3720 REM ** Corregir razón **
3730 LOCATE 20,36:INPUT "Corregir razón nº: ",NC
3740 SC1=INSTR(R$(NC),"=")
3750 RC$=LEFT$(R$(NC),SC1):LR=LEN(RC$)
3760 LOCATE 21,36:PRINT "Nuevo valor: ";R$(NC);:LOCATE 21,49+LR:LINE
INPUT A$
3770 R$(NC)=RC$+A$
3780 GOTO 3390
3790 REM ** Fin **
3800 CLS:OP%=5
3810 IF NC=0 THEN PCOPY 1,0:RETURN ELSE RETURN 280
3820 REM *** Control de errores del editor ***
3830 LOCATE 5,10:PRINT "¡NO HAY RAZONES QUE EDITAR!"
3840 LOCATE 8,12:PRINT "Pulse una tecla."

```

```

3850 WHILE INKEY$="":WEND
3860 CLS 1:CLS 2:PCOPY 1,0
3870 RETURN
3880 REM *** Desactivar teclas ***
3890 KEY OFF:KEY (4) OFF:KEY (5) ON
3900 RETURN
3910 REM *** Activar teclas ***
3920 KEY ON:KEY (5) OFF:KEY (4) ON
3930 RETURN
3940 REM *** Control de errores ***
3950 IF ERL=990 THEN PRINT "Archivo no encontrado":RESUME 980
3960 IF ERL=1120 THEN PRINT "Archivo no encontrado":RESUME 1110
3970 PRINT "Error nº=";ERR;" en línea ";ERL:STOP
4500 REM *** Definición de la función poligonal del continuo ***
4510 DELTA=X(2)-X(1)
4520 DEF FNINDEX(X)=INT((X-X(1))/DELTA)+1
4530 DEF FNINTERPOL(X)=(Y(IND+1)-Y(IND))*(X-X(IND))/DELTA+Y(IND)
4540 RETURN
5000 REM *** Valores del continuo ***
5010 PCOPY 0,1
5020 CLS 1:CLS 2
5025 GOSUB 4500:REM * Define función poligonal del continuo *
5030 LOCATE 2,10:PRINT "VALORES DEL CONTINUO"
5040 LOCATE 5,4:PRINT "1. Rango de valores."
5050 LOCATE 7,4:PRINT "2. Razón de valores."
5060 LOCATE 9,4:PRINT "3. Volver."
5070 LOCATE 11,4:INPUT "Elija opción: ",OP%
5080 IF OP%=3 THEN CLS 1:CLS 2:PCOPY 1,0:RETURN
5090 ON OP% GOSUB 5110,5300
5100 GOTO 5020
5110 CLS 1:CLS 2
5120 INPUT "Valores (l.d.o. inicial, l.d.o. final): ";LDOI,LDOF
5130 INPUT "Número de puntos";PTOS
5140 CLS 1:CLS 2:PASO=INT((LDOF-LDOI)/PTOS)
5150 PRINT:PRINT " L.d.o. (";CHR$(143);")","Valor continuo"
5160 FOR I=LDOI TO LDOF STEP PASO
5170 X=I:GOSUB 3200:REM * Cálculo del valor con la función poligonal *
5180 PRINT " ";I,Z

```

```
5190 NEXT I
5195 KEY(2) ON
5200 WHILE INKEY$="":WEND
5205 KEY(2) OFF
5210 RETURN
5300 CLS 1:CLS 2:INPUT "Razón = ",RAZON$
5310 BARRA=INSTR(RAZON$,"/")
5320 RAZON1=VAL(LEFT$(RAZON$,BARRA-1))
5330 RAZON2=VAL(RIGHT$(RAZON$,LEN(RAZON$)-BARRA))
5340 X=RAZON1:GOSUB 3200:VAL1=Z
5350 X=RAZON2:GOSUB 3200:VAL2=Z:VALOR=VAL1/VAL2
5360 PRINT:PRINT "Razón de valores del continuo = ";VALOR
5365 KEY(2) ON
5370 WHILE INKEY$="":WEND
5375 KEY(2) OFF
5380 RETURN
```

A2. PROGRAMA RATIO

Este programa realiza el ajuste de las razones en eficiencia a la exponencial de un polinomio cúbico. La elección de esta función de ajuste es debida a que Bukow^{2,4} teniendo un sistema experimental muy similar al nuestro ha ajustado su función eficiencia a la exponencial de un polinomio de 2º grado. El tercer grado se ha introducido para no forzar el ajuste a ser simétrico en torno al máximo de eficiencia. A continuación se explica la teoría en la que se basa este tipo de cálculo.

$$\varepsilon_{fit}(\lambda) = k e^{a_1 \lambda^3 + a_2 \lambda^2 + a_3 \lambda}$$

Para ajustar $\varepsilon_{fit}(\lambda)$ a las razones de ramificación obtenidas experimentalmente con su correspondiente error, $r_{ij} \pm \sigma_{ij}$, hacemos lo siguiente:

$$r_{ij} \pm \sigma_{ij} = \frac{\varepsilon(\lambda_i)}{\varepsilon(\lambda_j)} \approx \frac{\varepsilon_{fit}(\lambda_i)}{\varepsilon_{fit}(\lambda_j)} = e^{a_1(\lambda_i^3 - \lambda_j^3) + a_2(\lambda_i^2 - \lambda_j^2) + a_3(\lambda_i - \lambda_j)}$$

$$\ln(r_{ij} \pm \sigma_{ij}) \approx a_1(\lambda_i^3 - \lambda_j^3) + a_2(\lambda_i^2 - \lambda_j^2) + a_3(\lambda_i - \lambda_j) \quad (A.1)$$

$$\ln(r_{ij} \pm \sigma_{ij}) = \ln\left(r_{ij} \left(1 \pm \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)\right) = \ln r_{ij} + \ln\left(1 \pm \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right) \approx \ln r_{ij} \pm \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}$$

Dividiendo (A.1) por $\lambda_i - \lambda_j$ y llamando:

$$\rho_k = \frac{\ln r_{ij}}{\lambda_i - \lambda_j} \quad \sigma_k = \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}(\lambda_i - \lambda_j)} \quad \alpha_k = \frac{\lambda_i^3 - \lambda_j^3}{\lambda_i - \lambda_j} = \lambda_i^2 + \lambda_i \lambda_j + \lambda_j^2 \quad \beta_k = \lambda_i + \lambda_j$$

por mínimos cuadrados generalizados la función a minimizar es

$$F(a_1, a_2, a_3) = \sum_{k=1}^n \left(\frac{a_1 \alpha_k + a_2 \beta_k + a_3 - \rho_k}{\sigma_k} \right)^2 = \min \quad n = \text{nº de razones}$$

Para reducir el ajuste a 2 parámetros podemos derivar en primer lugar F con respecto al parámetro a_3 y obtener una relación que ligue este parámetro con los otros dos (a_1 y a_2).

$$\frac{\partial F}{\partial a_3} = 2 \sum_{k=1}^n \frac{a_1 \alpha_k + a_2 \beta_k + a_3 - \rho_k}{\sigma_k^2} = 0$$

$$\text{Despejando } a_3 = \bar{\rho} - a_1 \bar{\alpha} - a_2 \bar{\beta} \quad (\text{A.2})$$

Siendo $\bar{\rho} = \frac{\sum_k \rho_k / \sigma_k^2}{\sum_k 1 / \sigma_k^2}$ la media ponderada, (análogamente para $\bar{\alpha}$ y $\bar{\beta}$).

Luego la función a minimizar queda:

$$F(a_1, a_2) = \sum_k \left(\frac{a_1 (\alpha_k - \bar{\alpha}) + a_2 (\beta_k - \bar{\beta}) - (\rho_k - \bar{\rho})}{\sigma_k} \right)^2 = \min$$

$$\text{Llamando } \hat{\rho}_k = \frac{\rho_k - \bar{\rho}_k}{\sigma_k} \quad (\text{análogo para } \hat{\alpha} \text{ y } \hat{\beta})$$

$$F(a_1, a_2) = \sum_k (a_1 \hat{\alpha}_k + a_2 \hat{\beta}_k - \hat{\rho}_k)^2 = \min \quad (\text{A.3})$$

Ahora bien, ésto corresponde a una regresión lineal con dos variables explicativas, α_k y β_k . Para evitar problemas de multicolinealidad, Peña^{2.8}, derivados de la dependencia de estas variables, podemos realizar un cambio de variable que las convierta en ortogonales.

$$\hat{\rho}_k \approx a_1 \hat{\alpha}_k + a_2 \hat{\beta}_k$$

$$\text{Llamando } \bar{\rho} = \begin{pmatrix} \hat{\rho}_1 \\ \vdots \\ \hat{\rho}_n \end{pmatrix} \quad \chi = \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_1 & \hat{\beta}_1 \\ \vdots & \vdots \\ \hat{\alpha}_n & \hat{\beta}_n \end{pmatrix} \quad \bar{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

$$\bar{\rho} \approx \chi \bar{a} = Z \bar{a}' \quad (\text{A.4})$$

La matriz que nos ofrece el cambio de variables $\chi \rightarrow Z$ (de tal manera que las variables α_k y β_k sean independientes), es la matriz formada por los autovectores columna de la matriz $\chi' \chi$.

$$Z = \chi V \quad V = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{21} \\ v_{12} & v_{22} \end{pmatrix} \quad \bar{v}_1 = \begin{pmatrix} v_{11} \\ v_{12} \end{pmatrix} \quad \bar{v}_2 = \begin{pmatrix} v_{21} \\ v_{22} \end{pmatrix}$$

$$\text{Donde } \chi' \chi \bar{v}_i = \lambda_i \bar{v}_i$$

Cumplíendose $\bar{v}_1 \perp \bar{v}_2$ porque $\chi' \chi$ es simétrica

Las nuevas variables \bar{z}_i son independientes entre sí al tener covarianza nula. Efectivamente:

$$\begin{aligned} Cov(\bar{z}_i, \bar{z}_j) &= \bar{v}_j' \chi' \chi \bar{v}_i = \lambda_i \bar{v}_j' \bar{v}_i = 0 \\ Var(\bar{z}_i) &= E(\bar{v}_i' \chi' \chi \bar{v}_i) = E(\lambda_i \bar{v}_i' \bar{v}_i) = \lambda_i \sum v_{ij}^2 = \lambda_i \end{aligned}$$

Donde normalizamos los autovectores

Como las variables explicativas ahora son ortogonales la estimación de los parámetros vendrá dada por:

$$a'_i = \frac{Cov(\bar{\rho}, \bar{z}_i)}{Var(\bar{z}_i)} = \frac{\bar{\rho}' \chi \bar{v}_i}{\lambda_i} \quad (A.5)$$

Para deducir esta fórmula basta multiplicar matricialmente por Z' la ecuación (A.4):

$$Z' \bar{\rho} = Z' Z \bar{a}' \quad (A.6)$$

$$\text{donde } Z' Z = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \text{ porque } Z = \chi V \Rightarrow Z' Z = V' \chi' \chi V = D$$

V es la matriz de cambio de base que convierte $\chi' \chi$ en diagonal. Ahora bien, de (A.6):

$$Z' \bar{\rho} = V' \chi' \bar{\rho} = \begin{pmatrix} \lambda_1 a'_1 \\ \lambda_2 a'_2 \end{pmatrix}$$

De donde se deduce (A.5) fácilmente.

Deshaciendo el cambio obtenemos los parámetros a_1 y a_2 . A su vez con (A.2) podemos calcular el parámetro a_3 .

$$\chi \bar{a} = Z \bar{a}' = \chi V \bar{a}' \Rightarrow \underline{\bar{a} = V \bar{a}'} \quad (A.7)$$

Una vez obtenidos los parámetros a_1 , a_2 y a_3 podemos calcular k normalizando la curva a la unidad en el máximo.

Podemos también obtener los errores de los parámetros calculados. La forma más simple es partir de los parámetros a'_i que son independientes.

$$\Delta a'_i = \hat{s}_R \sqrt{1/\lambda_i}$$

$$\hat{s}_R^2 = \frac{1}{n-3} \sum_k (\hat{\rho}_k - a'_1 z_{1k} - a'_2 z_{2k})^2$$

Ahora, deshaciendo el cambio de variable y volviendo a utilizar (A.2):

$$\Delta \bar{a} = V \Delta \bar{a}' \quad \Delta a_3 = -(\bar{\alpha} \Delta a_1 + \bar{\beta} \Delta a_2)$$

Nos queda, por tanto, la siguiente curva de ajuste:

$$\varepsilon_{fit}(\lambda) = k e^{(a_1 \pm \Delta a_1) \lambda^3 + (a_2 \pm \Delta a_2) \lambda^2 + (a_3 \pm \Delta a_3) \lambda}$$

Cabe señalar que los parámetros a_1 , a_2 y a_3 tienen dimensiones de L^{-3} , L^{-2} y L^{-1} respectivamente y por tanto variarán según la unidad elegida para la longitud de onda. La constante de normalización k es adimensional.

Podemos utilizar el coeficiente de determinación corregido para ver el grado de ajuste en (A.3):

$$\bar{R}^2 = 1 - \frac{\frac{1}{n-3} \sum_k (a_1 \hat{\alpha}_k + a_2 \hat{\beta}_k - \hat{\rho}_k)^2}{\frac{1}{n-1} \sum_k (\hat{\rho}_k - \hat{\rho})^2} \quad \hat{\rho} = \frac{1}{n} \sum_k \hat{\rho}_k \quad (\text{A.8})$$

Como nuestros datos son las razones experimentales es conveniente definir el siguiente coeficiente de determinación porcentual:

$$R^2_{\alpha} = 1 - \frac{\sum_{ij}^n \left\{ \left(r_{ij} - \frac{\varepsilon_{\mu}(\lambda_i)}{\varepsilon_{\mu}(\lambda_j)} \right) / r_{ij} \right\}^2}{\sum_{ij} \left\{ (r_{ij} - \bar{r}) / r_{ij} \right\}^2} \quad \bar{r} = \frac{1}{n} \sum_{ij} r_{ij} \quad (\text{A.9})^{(*)}$$

Se suele definir un índice llamado *índice de condicionamiento*, Peña^{2.9}, para estimar la multicolinealidad que presentan nuestros datos. Éste índice mide la singularidad de la *matriz de correlación* que en nuestro caso es:

$$R = \begin{pmatrix} 1 & r \\ r & 1 \end{pmatrix} \quad r = \frac{\text{Cov}(\hat{\alpha}, \hat{\beta})}{s_{\hat{\alpha}} s_{\hat{\beta}}}$$

Donde r es el coeficiente de correlación lineal entre $\hat{\alpha}$ y $\hat{\beta}$.

Si λ_1, λ_2 son el autovalor mayor y menor respectivamente de la matriz R , el *índice de condicionamiento* se define como:

$$Ic = \sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_2}} = \sqrt{\frac{1+|r|}{1-|r|}} \geq 1 \quad (\text{A.10})$$

Podemos observar que al ser r independiente de las unidades de medida o escala escogida, el índice de condicionamiento también lo será.

Este índice se suele interpretar según la siguiente tabla.

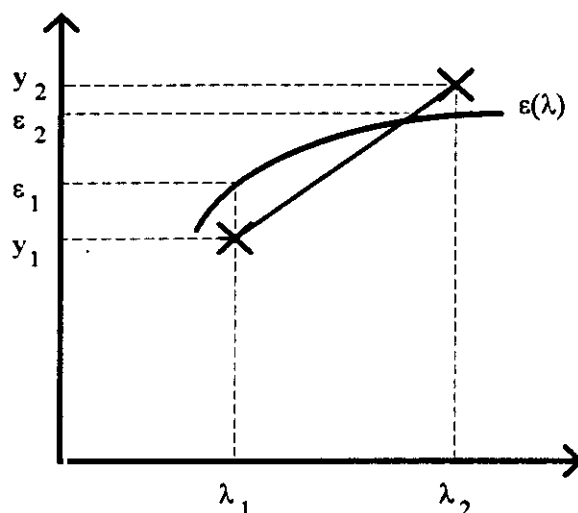
Multicolinealidad	Ic
Alta	>30
Moderada	10-30
Baja	<10

(*) No se puede dar el coeficiente de determinación para las razones porque el residuo entre la razón experimental y la teórica puede ser igual en dos casos dados, pero no representar la misma desviación de la razón respecto de la curva teórica en ambos casos.

P. ej. hay mucho más ajuste siendo $e=0.3$, cuando $r=5.3$ que cuando $r=0.9$. Por eso se define un parámetro de desviación porcentual. Éste parámetro no es idóneo cuando estemos comparando razones con valores muy altos con razones con valores muy bajos, porque la pendiente de una curva no es una función lineal.

A diferencia del método de interpolación-extrapolación para representar la curva de eficiencia, este método presenta la ventaja de no acumular error al ir reconstruyendo la curva. Asimismo se ha comprobado que el presente método de ajuste reproduce las curvas dadas por otros autores, Cunningham^{2.3}, Bukow^{2.4} y Sato^{2.5}.

Para tener una representación de la bondad del ajuste, podemos calcular unos puntos auxiliares y_1, y_2 de la siguiente manera:



$$\frac{y_1}{y_2} = r \quad (y_1 - \varepsilon_1) + (y_2 - \varepsilon_2) \approx 0$$

De nuevo por mínimos cuadrados la función a minimizar es:

$$G(y_2) = (y_2 r - \varepsilon_1)^2 + (y_2 - \varepsilon_2)^2 = \min$$

Basta derivar e igualar a cero para obtener dichos puntos.

$$y_2 = \frac{\varepsilon_2 + r \varepsilon_1}{1 + r^2} \quad y_1 = r y_2$$

La relación entre el error relativo de cada razón y el error relativo de cada punto auxiliar es:

$$\frac{dy_1}{y_1} = (\alpha + 1) \frac{dr}{r} \quad \frac{dy_2}{y_2} = \alpha \frac{dr}{r}$$

Donde:

$$\alpha = \frac{r \varepsilon_1}{r \varepsilon_1 + \varepsilon_2} - \frac{2}{1 + r^2}$$

```

10 REM *****
20 REM *** RAZONES DE RAMIFICACION *** Versión 4.0 *****
30 REM *****
40 REM ***** por Juan Luis González-Santander *** 1996 *****
50 REM *****
60 CLS: CLEAR: KEY OFF: SCREEN 9: F#= .4342944819#
70 COLOR 7,0
80 ON ERROR GOTO 4740
90 KEY 1, CHR$(241): REM ** Define f1=± **
100 ON KEY(2) GOSUB 4960: REM ** Define f2=invertir colores, para imprimir
**
110 ON KEY(3) GOSUB 5860: REM ** Define f3=Malla logarítmica **
120 ON KEY(4) GOSUB 5130: REM ** Define ocultamiento bandas **
130 ON KEY(5) GOSUB 5080: REM ** Define ocultamiento puntos auxiliares **
140 ON KEY(6) GOSUB 5180: REM ** Define ocultamiento gráfico principal **
150 ON KEY(7) GOSUB 5230: REM ** Define ocultamiento barras de error **
160 ON KEY(8) GOSUB 5280: REM ** Activa/Desactiva la barra del menú **
170 ON KEY(9) GOSUB 5320: REM ** Sobreimpresión del continuo **
180 KEY (2) OFF: KEY (3) OFF: KEY (4) OFF: KEY (5) OFF: KEY (6) OFF: KEY
(7) OFF
190 KEY (8) ON: KEY (9) ON
200 KEY 2, " Inv.c": KEY 3, " Malla": KEY 4, " Bandas": KEY 5, " Punto"
210 KEY 6, " Graf": KEY 7, " Error": KEY 8, "On/off": KEY 9, " Cont"
220 KEY 10, " ---": KEY OFF
230 DIM HORIZONTAL(500), VERTICAL(500)
240 DIM R$(10), XC(10), YC(10)
250 LOCATE 3,18: PRINT "**** CÁLCULO DE LA EFICIENCIA RELATIVA ****"
260 LOCATE 4,18: PRINT "**** DE UN ESPECTRÓMETRO EN EL U.V.V. ****"
270 LOCATE 5,18: PRINT "**** MEDIANTE RAZONES DE RAMIFICACIÓN ****"
280 REM
290 REM ** MENÚ PRINCIPAL **
300 REM
310 LOCATE 9,15: PRINT "1. Introducir razones."
320 LOCATE 11,15: PRINT "2. Leer razones."
330 LOCATE 13,15: PRINT "3. Salir."
340 LOCATE 15,15: INPUT "Elija opción: ", OP%
350 IF OP%=1 THEN GOSUB 4540: GOTO 390
360 IF OP%=2 THEN GOSUB 4240: GOTO 390

```

```

370 IF OP%=3 THEN CLS:SYSTEM
380 GOTO 340
390 DIM LDO(N),R(NR,2),RS(NR,20),RLDO(NR,2),COMA(20)
400 DIM ER(NR),N(NR),ERY#(NR,2),Y#(NR,2)
410 DIM
RO(NR),ER2(NR),ALFA(NR),BETA(NR),GI(NR,2),H(2,2),GIRRO(2),AD(2),A(2)
420 DIM V(2,2),Z(NR,2),DELTA(3)
430 REM *** INTERPRETACIÓN DE DATOS ***
440 DEF FNPART(I,X,Y)=VAL(MID$(R$(I),X+1,Y-X-1))
450 PESO=0:ROMEDIA=0:BETAMEDIA=0:ALFAMEDIA=0
460 FOR I=1 TO NR
470 R$(I)=R$(I)+","
480 S1=0:S2=0:S3=0:Z=2
490 S1=INSTR(R$(I),"I")
500 S2=INSTR(R$(I),"=")
510 S3=INSTR(R$(I),CHR$(241))
520 COMA(1)=S2
530 COMA(2)=INSTR(R$(I),",")
540 WHILE NOT COMA(Z)=0
550 Z=Z+1:COMA(Z)=INSTR(COMA(Z-1)+1,R$(I),",")
560 WEND
570 RLDO(I,1)=FNPART(I,0,S1)/100
580 RLDO(I,2)=FNPART(I,S1,S2)/100
590 ALFA(I)=RLDO(I,1)^2+RLDO(I,2)^2+RLDO(I,1)*RLDO(I,2)
600 BETA(I)=RLDO(I,1)+RLDO(I,2)
610 RDG=RLDO(I,1)-RLDO(I,2):REM ** Factor de reducción de grado **
620 IF S3<>0 THEN GOSUB 4470:GOTO 720
630 FOR K=1 TO Z-2
640 RS(I,K)=FNPART(I,COMA(K),COMA(K+1))
650 R(I,1)=R(I,1)+RS(I,K)
660 R(I,2)=R(I,2)+RS(I,K)^2
670 NEXT K
680 R(I,1)=R(I,1)/(Z-2):REM ** Razón media **
690 IF Z=3 THEN ER(I)=1:GOTO 720
700 ER(I)=SQR((R(I,2)-(Z-2)*R(I,1)^2)/(Z-3))/R(I,1):REM *Error relativo-razón*
710 N(I)=1/ER(I)^2
720 RO(I)=LOG(R(I,1))/RDG:ER2(I)=ER(I)/RDG:PESO=PESO+1/ER2(I)^2
730 ROMEDIA=ROMEDIA+RO(I)/ER2(I)^2

```

```

740 ALFAMEDIA=ALFAMEDIA+ALFA(I)/ER2(I)^2
750 BETAMEDIA=BETAMEDIA+BETA(I)/ER2(I)^2
760 NEXT I
770
ROMEDIA=ROMEDIA/PESO:ALFAMEDIA=ALFAMEDIA/PESO:BETAMEDIA=B
ETAMEDIA/PESO
780 REM ** Quitar la coma del final y caracterizar matriz GI **
790 FOR I=1 TO NR
800 ALFA(I)=(ALFA(I)-ALFAMEDIA)/ER2(I):GI(I,1)=ALFA(I)
810 BETA(I)=(BETA(I)-BETAMEDIA)/ER2(I):GI(I,2)=BETA(I)
820 RO(I)=(RO(I)-ROMEDIA)/ER2(I)
830 R$(I)=LEFT$(R$(I),LEN(R$(I))-1)
840 NEXT I
850 REM *** L.D.O. máxima y mínima ***
860 FOR I=0 TO NR-1
870 FOR J=1 TO 2
880 LDO(2*I+J)=RLDO(I+1,J)*100
890 NEXT J,I
900 FOR K=1 TO N-1
910 FOR L=K+1 TO N
920 IF LDO(K)>LDO(L) THEN SWAP LDO(K),LDO(L)
930 NEXT L,K
940 MINLDO=LDO(1):MAXLDO=LDO(N)
950 ERASE LDO:DIM LDO(N)
960 REM *** Matriz H=Glt.GI ***
970 ERASE H:DIM H(2,2)
980 FOR K=1 TO 2
990 FOR L=K TO 2
1000 FOR I=1 TO NR
1010 H(L,K)=H(L,K)+GI(I,K)*GI(I,L)
1020 NEXT I
1030 H(K,L)=H(L,K)
1040 NEXT L,K
1050 REM **** DIAGONALIZACIÓN ****
1060 REM ** Autovalores **
1070 TRAZA=0
1080 FOR I=1 TO 2
1090 TRAZA=TRAZA+H(I,I)

```

```

1100 NEXT I
1110 DETERMINANTE=H(1,1)*H(2,2)-H(1,2)*H(2,1)
1120 DISCRIMINANTE=TRAZA^2-4*DETERMINANTE
1130 LAMBDA(1)=(TRAZA+SQR(DISCRIMINANTE))/2
1140 LAMBDA(2)=(TRAZA-SQR(DISCRIMINANTE))/2
1150 REM ** Autovectores **
1160 ERASE V: DIM V(2,2)
1170 FOR I=1 TO 2
1180 NORMA=SQR((H(1,1)-LAMBDA(I))^2+H(1,2)^2)
1190 V(I,1)=H(1,2)/NORMA: V(I,2)=(LAMBDA(I)-H(1,1))/NORMA
1200 NEXT I
1210 REM *** Cálculo de las variables ortogonalizadas ***
1220 ERASE Z: DIM Z(NR,2)
1230 FOR I=1 TO NR
1240 FOR K=1 TO 2
1250 FOR J=1 TO 2
1260 Z(I,K)=Z(I,K)+GI(I,J)*V(K,J)
1270 NEXT J,K,I
1280 REM *** Cálculo de los coeficientes del polinomio ***
1290 ERASE GIRRO: DIM GIRRO(2)
1300 FOR L=1 TO 2
1310 FOR I=1 TO NR
1320 GIRRO(L)=GIRRO(L)+GI(I,L)*RO(I)
1330 NEXT I,L
1340 ERASE AD: DIM AD(2)
1350 FOR I=1 TO 2
1360 FOR K=1 TO 2
1370 AD(I)=AD(I)+V(I,K)*GIRRO(K)
1380 NEXT K,I
1390 AD(1)=AD(1)/LAMBDA(1): AD(2)=AD(2)/LAMBDA(2)
1400 ERASE A: DIM A(2)
1410 FOR K=1 TO 2
1420 FOR I=1 TO 2
1430 A(K)=A(K)+V(I,K)*AD(I)
1440 NEXT I,K
1450 A(0)=A(1): B(0)=A(2): C(0)=ROMEDIA-A(0)*ALFAMEDIA-
B(0)*BETAMEDIA
1460 REM *** Coeficiente de determinación ***

```

```

1470 ROMEDIA2=0
1480 FOR I=1 TO NR
1490 ROMEDIA2=ROMEDIA2+RO(I)
1500 NEXT I
1510 ROMEDIA2=ROMEDIA2/NR
1520 VNE=0:VT=0:VNE2=0
1530 FOR I=1 TO NR
1540 VNE=VNE+(A(0)*ALFA(I)+B(0)*BETA(I)-RO(I))^2
1550 VNE2=VNE2+(AD(1)*Z(I,1)+AD(2)*Z(I,2)-RO(I))^2
1560 VT=VT+(RO(I)-ROMEDIA2)^2
1570 NEXT I
1580 VNE=VNE/(NR-3):VT=VT/(NR-1):VNE2=VNE2/(NR-3)
1590 RDET=SQR(1-VNE/VT)
1600 REM *** Error en los parámetros A,B,C ***
1610 FOR L=1 TO 2:ADDELTA(L)=SQR(VNE2/LAMBDA(L)):NEXT L
1620 ERASE DELTA:DIM DELTA(3)
1630 FOR I=1 TO 2
1640 FOR J=1 TO 2
1650 DELTA(I)=V(J,I)*ADDELTA(J)+DELTA(I)
1660 NEXT J,I
1670 DELTA(3)=- (ALFAMEDIA*DELTA(1)+BETAMEDIA*DELTA(2))
1680 A(1)=A(0)+DELTA(1):A(2)=A(0)-DELTA(1)
1690 B(1)=B(0)+DELTA(2):B(2)=B(0)-DELTA(2)
1700 C(1)=C(0)+DELTA(3):C(2)=C(0)-DELTA(3)
1710 REM *** Coeficiente de correlación entre alfa-beta ***
1720 SALFA=0:SBETA=0:COV=0
1730 FOR I=1 TO NR
1740 SALFA=SALFA+(ALFA(I)-ALFAMEDIA)^2:SBETA=SBETA+(BETA(I)-
BETAMEDIA)^2
1750 COV=COV+(ALFA(I)-ALFAMEDIA)*(BETA(I)-BETAMEDIA)
1760 NEXT I
1770 SALFA=SQR(SALFA/NR):SBETA=SQR(SBETA/NR):COV=COV/NR
1780 R=COV/(SALFA*SBETA)
1790 REM *** Índice de condicionamiento ***
1800 IC=SQR((1+ABS(R))/(1-ABS(R)))
1810 REM ** Calculo I.d.o. que hace máx. la eficiencia **
1820 FOR I=0 TO 2
1830 A=A(I):B=B(I):C=C(I)

```



```

1840 PP=SQR(B^2-3*A*C)
1850 L1#=(-B+PP)/(3*A):L2#=(-B-PP)/(3*A)
1860 IF 6*A*L1#+2*B+(3*A*L1#^2+2*B*L1#+C)^2>0 THEN LDOMAX#(I)=L2#
ELSE LDOMAX#(I)=L1#
1870 REM * Calculo d para que la curva esté normalizada a 1 en el máximo **
1880 D(I)=-LDOMAX#(I)*(A*LDOMAX#(I)^2+B*LDOMAX#(I)+C)
1890 NEXT I
1900 REM *** Factores de conversión ***
1910 FOR I=1 TO 3:DELTA(I)=ABS(DELTA(I)*10^(2*I-8)):NEXT I
1920 FOR I=0 TO 2
1930 A(I)=A(I)*.000001:B(I)=B(I)*.0001:C(I)=C(I)*.01
1940 LDOMAX#(I)=LDOMAX#(I)*100
1950 NEXT I
1960 ERLDOMAX=ABS(LDOMAX#(1)-LDOMAX#(2))/2
1970 REM ** Defino la funciones de ajuste **
1980 DEF FNEF#(X,I)=EXP(A(I)*X^3+B(I)*X^2+C(I)*X+D(I))
1990 FOR I=1 TO NR
2000 FOR L=1 TO 2
2010 RLDO(I,L)=RLDO(I,L)*100
2020 NEXT L,I
2030 REM *** Coeficiente de determinación porcentual ***
2040 RAZONMEDIA=0:RESIDUOREL=0:SIGMAREL=0
2050 FOR I=1 TO NR
2060 RAZONMEDIA=RAZONMEDIA+R(I,1)
2070 NEXT I
2080 RAZONMEDIA=RAZONMEDIA/NR
2090 FOR I=1 TO NR
2100 RESIDUOREL=RESIDUOREL+(1-
FNEF#(RLDO(I,1),0)/(FNEF#(RLDO(I,2),0)*R(I,1)))^2
2110 SIGMAREL=SIGMAREL+(1-RAZONMEDIA/R(I,1))^2
2120 NEXT I
2130 RB=SQR(1-RESIDUOREL/SIGMAREL)
2140 REM *** CÁLCULO DE LOS PUNTOS ***
2150 FOR I=1 TO NR
2160 FK=1+R(I,1)^2
2170 KK#=R(I,1)*FNEF#(RLDO(I,1),0)+FNEF#(RLDO(I,2),0)
2180 ALFA=FNEF#(RLDO(I,1),0)*R(I,1)/KK#-2/FK
2190 Y#(I,1)=KK#*R(I,1)/FK:Y#(I,2)=KK#/FK

```

```

2200 FOR L=1 TO 2
2210 IF L=1 THEN JFK=1 ELSE JFK=0
2220 ERY#(I,L)=(ALFA+JFK)*ER(I)
2230 NEXT L,I
2240 REM ** IMPRESIÓN DE PARÁMETROS **
2250 CLS
2260 LOCATE 1,20:PRINT "CÁLCULO DE PARÁMETROS DE
AJUSTE":PRINT:PRINT
2270 PRINT " El ajuste viene dado por el polinomio cúbico"
2280 PRINT " normalizado a la unidad en escala logarítmica:"
2290 PRINT:PRINT "       $\text{Ln}(Y) = A.X^3 + B.X^2 + C.X + D$  "
2300 PRINT:PRINT "A = ";A(0);"±";DELTA(1);CHR$(143);"^3","B = ";B(0);"±
";DELTA(2);CHR$(143);"^2"
2310 PRINT "C = ";C(0);"±";DELTA(3);CHR$(143);"^1","D = ";D(0)
2320 LDOMAX=LDOMAX#(0)
2330 PRINT:PRINT " El máximo de la eficiencia se encuentra en:"
2340 PRINT:PRINT "      Ef.m x = ";LDOMAX;"±";ERLDOMAX;"
"+CHR$(143):PRINT
2350 PRINT:PRINT " Coeficiente de determinación del ajuste y porcentual:"
2360 PRINT:PRINT "      R = ";RDET,"R% = ";RB
2370 PRINT:PRINT " El índice de condicionamiento es:"
2380 PRINT:PRINT "      IC = ";IC
2390 KEY (2) ON
2400 WHILE INKEY$=""
2410 WEND
2420 KEY (2) OFF
2430 REM
2440 REM ** REPRESENTACIÓN GRÁFICA **
2450 REM
2460 REM ** ELECCIÓN DE ESCALA **
2470 CLS
2480 LOCATE 3,25:PRINT "ELECCIÓN DE ESCALA"
2490 LOCATE 5,20:PRINT "1. Elección automática"
2500 LOCATE 7,20:PRINT "2. Elección manual"
2510 LOCATE 9,20:INPUT "Elija opción: ",OP
2520 ON OP GOSUB 2540,2600
2530 GOTO 2760
2540 X1=INT(MINLDO/50)*50:XN=INT(MAXLDO/50+1)*50

```

```

2550 EFMIN1=FNEF#(X1,0):EFMIN2=FNEF#(XN,0)
2560 IF EFMIN1>EFMIN2 THEN EFMIN=EFMIN2 ELSE EFMIN=EFMIN1
2570 IF EFMIN>.1 THEN NDEC=1:GOTO 2590
2580 IF EFMIN<.1 AND EFMIN>.01 THEN NDEC=2 ELSE NDEC=3
2590 RETURN
2600 X1I=X1:XNI=XN:LOCATE 22,10:PRINT "Enter = última elección"
2610 LOCATE 13,4:PRINT "EJE DE ABSCISAS en ";CHR$(143)
2620 LOCATE 15,1:PRINT "Margen izquierdo:";X1;CHR$(143)
2630 PRINT "Margen derecho:";XN;CHR$(143)
2640 PRINT:INPUT "Introduzca margen izquierdo:";X1
2650 IF X1=0 THEN X1=X1I
2660 INPUT "Introduzca margen derecho:";XN
2670 IF XN=0 THEN XN=XNI
2680 NDECI=NDEC
2690 LOCATE 13,34:PRINT "EJE DE ORDENADAS (escala logarítmica)"
2700 LOCATE 15,32:PRINT "Número de décadas:";NDEC
2710 LOCATE 16,32:INPUT "Introduzca nº de décadas (1-3): ";NDEC
2720 NDEC=INT(NDEC)
2730 IF NDEC=0 THEN NDEC=NDECI
2740 IF NDEC>3 OR NDEC<1 THEN GOTO 2710
2750 CLS:RETURN
2760 REM * Nombre del archivo **
2770 CLS
2780 LOCATE 1,5:PRINT "Razones: ";NOMRAZON$
2790 REM ** Eje ordenadas **
2800 LOCATE 2,2:PRINT "1"
2810 IF NDEC=2 THEN LOCATE 12,1:PRINT ".1"
2820 IF NDEC=3 THEN LOCATE 9,1:PRINT ".1":LOCATE 15,1:PRINT ".01"
2830 REM ** Eje abscisas **
2840 RECX=ABS(X1-XN):HX=INT(RECX/200+.5)*50
2850 IF RECX/HX>4 THEN SCL=2:S=7.5:RS=S-.6:SS=8 ELSE
SCL=1:S=15:RS=S-4:SS=14
2860 NUM=-1:XNUM=0
2870 WHILE XNUM<XN
2880 NUM=NUM+1
2890 XNUM=X1+HX*NUM
2900 LOCATE 23,INT(RS*NUM)+SS:PRINT XNUM
2910 WEND

```

```

2920 LOCATE 23,INT(RS*NUM)+SS+12:PRINT CHR$(143)
2930 NCANAL=8*S*NUM
2940 ACH#=ABS(X1-XNUM)/NCANAL:REM * Angstrom por canal *
2950 QX=HX/40
2960 DEF FNCY#(X)=1+(F#*LOG(X))/NDEC
2970 VIEW (25,6)-(95+NCANAL,300)
2980 WINDOW (X1-HX,0)-(XNUM+HX,1.05)
2990 REM *** Define las matrices de malla ***
3000 LINE (XNUM+HX,0)-(X1-HX+2*QX,0),3,,&HCCCC
3010 GET (XNUM+HX,0)-(X1-HX+2*QX,0),HORIZONTAL
3020 LINE (X1-HX,1/60)-(X1-HX,1),3,,&HCCCC
3030 GET (X1-HX,1/60)-(X1-HX,1),VERTICAL
3040 REM *** Pinta los ejes ***
3050 LINE (XNUM+HX,0)-(X1-HX,0)
3060 LINE -(X1-HX,1)
3070 FOR XRAYA=0 TO 9
3080 XR=X1+HX*XRAYA
3090 LINE (XR,0)-(XR,1/60)
3100 NEXT XRAYA
3110 FOR DEC=1 TO NDEC
3120 FOR YRAYA=1 TO 10
3130 YR=FNCY#(YRAYA*10^(-DEC)):LINE (X1-HX,YR)-(X1-HX+2*QX,YR)
3140 NEXT YRAYA,DEC
3150 REM ** PINTA POLINOMIO DE AJUSTE **
3160 FOR I=1 TO NCANAL
3170 XT=X1+I*ACH#:YT#=FNCY#(FNEF#(XT,0))
3180 XT1=X1+(I+1)*ACH#:YT1#=FNCY#(FNEF#(XT1,0))
3190 YB1#=FNCY#(FNEF#(XT,1)):YB2#=FNCY#(FNEF#(XT,2))
3200 PSET (XT,YB1#),9:PSET (XT,YB2#),9
3210 LINE (XT,YT#)-(XT1,YT1#),12
3220 NEXT I
3230 RADIO=SCL*1.1*SQR(QX^2+(1/80)^2)
3240 FOR I=1 TO NR
3250 FOR L=1 TO 2
3260 REM *** PINTA LAS BARRAS DE ERROR ***
3270 XP=RLDO(I,L):YP#=FNCY#(Y#(I,L))
3280 IF ER(I)=1 THEN GOTO 3340
3290 YE1#=FNCY#(Y#(I,L)*(1+ERY#(I,L)))

```

```

3300 YE2#=FNCY#(Y#(I,L)*(1-ERY#(I,L)))
3310 LINE (XP-QX,YE1#)-(XP+QX,YE1#),4
3320 LINE (XP,YE1#)-(XP,YE2#),4
3330 LINE (XP-QX,YE2#)-(XP+QX,YE2#),4
3340 REM *** PINTA LOS PUNTOS ***
3350 CIRCLE (XP,YP#),RADIO,2
3360 CIRCLE (XP,YP#),RADIO,2
3370 NEXT L,I
3380 PALETTE 4,2
3390 KEY (2) ON:KEY (3) ON:KEY (4) ON:KEY (5) ON
3400 KEY (6) ON:KEY (7) ON:KEY ON
3410 WHILE INKEY$="":WEND
3420 KEY (2) OFF:KEY (3) OFF:KEY (4) OFF:KEY (5) OFF
3430 KEY (6) OFF:KEY (7) OFF:KEY OFF:NCC=0:INVC=0
3440 INV=0:INVE=0:INVP=0:INVB=0:INVG=0:ONOFF=0
3450 REM ** MENÚ DE OPCIONES **
3460 SCREEN 0,0,0:SCREEN 9:COLOR 7,0
3470 LOCATE 1,1:INPUT "Imprimir razones (s/n)";OP$
3480 IF OP$="S" OR OP$="s" THEN GOSUB 3650:CLS:GOTO 3510
3490 IF OP$="N" OR OP$="n" THEN GOTO 3510
3500 GOTO 3470
3510 PRINT:INPUT "Imprimir valores de la eficiencia (s/n)";OP$
3520 IF OP$="S" OR OP$="s" THEN GOSUB 5520:CLS:GOTO 3550
3530 IF OP$="n" OR OP$="n" THEN GOTO 3550
3540 GOTO 3510
3550 PRINT:INPUT "Salvar razones (s/n)";OP$
3560 IF OP$="S" OR OP$="s" THEN GOSUB 4810:GOTO 3590
3570 IF OP$="N" OR OP$="n" THEN GOTO 3590
3580 REM ** Menú final **
3590 CLS:LOCATE 5,5:PRINT "1. Menú principal"
3600 LOCATE 7,5:PRINT "2. Editar razones"
3610 LOCATE 10,5:INPUT "Elija opción:",OP%
3620 IF OP%=1 THEN GOTO 10
3630 IF OP%=2 THEN GOSUB 3750:GOTO 430
3640 GOTO 3590
3650 REM *** IMPRESIÓN DE RAZONES ***
3660 CLS
3670 FOR I=1 TO NR

```

```

3680 PRINT " Razón nº";I;" ";R$(I)
3690 NEXT I
3700 KEY (2) ON
3710 WHILE INKEY$=""
3720 WEND
3730 KEY (2) OFF
3740 RETURN
3750 REM **** EDITOR DE RAZONES ****
3760 CLS
3770 LOCATE 1,30:PRINT "EDITOR DE RAZONES"
3780 REM ** Impresión de razones y menú **
3790 FOR I=1 TO NR
3800 IF I>12 THEN POSX=1:POSY=1 ELSE POSX=0:POSY=0
3810 LOCATE 2+I-POSX*12,4+40*POSY:PRINT I;" ";R$(I)
3820 NEXT I
3830 LOCATE 17,12:PRINT "MENU."
3840 LOCATE 19,6:PRINT "1. Borrar razón."
3850 LOCATE 20,6:PRINT "2. Añadir razón."
3860 LOCATE 21,6:PRINT "3. Corregir razón."
3870 LOCATE 22,6:PRINT "4. Fin."
3880 LOCATE 23,6:INPUT "Elija opción: ",OPCION%
3890 IF OPCION%>4 OR OPCION%<1 THEN GOTO 3880
3900 ON OPCION% GOTO 3910,3990,4080,4150
3910 REM ** Borrar razón **
3920 LOCATE 20,36:INPUT "Borrar razón nº: ",NB
3930 NR=NR-1
3940 FOR I=NB TO NR
3950 R$(I)=R$(I+1)
3960 NEXT I
3970 R$(NR+1)=""
3980 GOTO 3750
3990 REM ** Añadir Razón **
4000 NR=NR+1
4010 LOCATE 20,36:INPUT "Posición nº: ",NA
4020 FOR I=NR TO NA+1 STEP -1
4030 R$(I)=R$(I-1)
4040 NEXT I
4050 LOCATE 21,36:PRINT "Razón nº";NA

```

```

4060 LOCATE 22,36:LINE INPUT R$(NA)
4070 GOTO 3750
4080 REM ** Corregir razón **
4090 LOCATE 20,36:INPUT "Corregir razón nº: ",NC
4100 SC1=INSTR(R$(NC), "=")
4110 RC$=LEFT$(R$(NC), SC1):LR=LEN(RC$)
4120 LOCATE 21,36:PRINT "Nuevo valor: ";R$(NC);:LOCATE 21,49+LR:LINE
INPUT A$
4130 R$(NC)=RC$+A$
4140 GOTO 3750
4150 REM ** Fin **
4160 CLS:N=2*NR
4170 PRINT "Una vez editadas las razones:"
4180 ERASE
LDO,R,RS,RLDO,COMA,N,ER,RO,ALFA,BETA,GI,H,GIRRO,A,AD,V,Y#,ERY#,
Z
4190 ERASE DELTA,ER2
4200 DIM
LDO(N),R(NR,2),RS(NR,20),RLDO(NR,2),COMA(20),N(NR),ER(NR),ER2(NR)
4210 DIM Y#(NR,2),ERY#(NR,2),Z(NR,2),DELTA(3)
4220 DIM
RO(NR),ALFA(NR),BETA(NR),GI(NR,2),H(2,2),GIRRO(2),AD(2),A(2),V(2,2)
4230 RETURN
4240 REM *** LECTURA DE RAZONES ***
4250 CLS:LOCATE 1,15:PRINT "LECTURA DE RAZONES"
4260 ERASE R$
4270 LOCATE 3,5:PRINT "Los archivos de razones disponibles son:"
4280 SHELL "dir/w *.raz"
4290 LOCATE 18,2:INPUT ""Nombre del archivo";NOMRAZON$
4300 OPEN "i",#1,NOMRAZON$
4310 NOMRAZON$=LEFT$(NOMRAZON$,LEN(NOMRAZON$)-4)
4320 INPUT #1,NR:N=2*NR
4330 DIM R$(NR+10)
4340 FOR I=1 TO NR
4350 INPUT #1,R$(I)
4360 NEXT I
4370 CLOSE #1
4380 CLS:PRINT

```

```

4390 PRINT " El archivo ";NOMRAZON$;" contiene las razones:":PRINT
4400 GOSUB 3670:REM ** Impresión de razones **
4410 PRINT:PRINT "    1. Otras razones."
4420 PRINT "    2. Continuar."
4430 PRINT:INPUT "    Elija opción: ",OP%
4440 IF OP%=1 THEN GOTO 4240
4450 IF OP%=2 THEN GOTO 390
4460 GOTO 4380
4470 REM *** Rutina introducción dato del error ***
4480 S4=0:S4=INSTR(R$(I),"%")
4490 R(I,1)=FNPART(I,S2,S3)
4500 IF S4=0 THEN
ER(I)=FNPART(I,S3,LEN(R$(I))+1)/R(I,1):N(I)=1/ER(I)^2:RETURN
4510 ER(I)=FNPART(I,S3,S4)/100
4520 N(I)=1/ER(I)^2
4530 RETURN
4540 REM ***INTRODUCCIÓN DE RAZONES ***
4550 CLS:PRINT:PRINT
4560 PRINT " Introduzca cada razón con alguno de estos formatos:"
4570 PRINT:PRINT "    L.d.o.1/L.d.o.2=razón1,razón2,..."
4580 PRINT:PRINT "    L.d.o.1/L.d.o.2=razón±error(%)"
4590 PRINT:PRINT " NOTA: Longitudes de onda en ";CHR$(143);" F1 =
";CHR$(241)
4600 PRINT:PRINT
4610 INPUT " Nombre de las razones";NOMRAZON$
4620 PRINT:INPUT " Cuántas razones va a introducir";NR
4630 ERASE R$:N=2*NR
4640 DIM R$(NR+10)
4650 CLS
4660 LOCATE 1,5:PRINT "INTRODUCCION DE LAS RAZONES.":PRINT
4670 VIEW PRINT 3 TO 22
4680 FOR I=1 TO NR
4690 PRINT "Razón nº";I:LINE INPUT R$(I)
4700 PRINT
4710 NEXT I
4720 VIEW PRINT 1 TO 24
4730 RETURN
4740 REM *** Control de errores ***

```



```

4750 IF ERL=4300 THEN PRINT " El archivo de las razones no se
encuentra.":RESUME 4290
4760 IF ERL=4880 THEN PRINT " Nombre de archivo incorrecto.":RESUME
4850
4770 IF ERL=5430 THEN PRINT " El archivo del continuo no se
encuentra.":RESUME 5420
4780 WHILE INKEY$=""
4790 WEND
4800 RETURN
4810 REM *** Salvar razones ***
4820 CLS:NOM$=""
4830 LOCATE 1,6:PRINT "SALVAR RAZONES"
4840 LOCATE 6,2:PRINT " Enter = nombre actual: ";NOMRAZON$
4850 LOCATE 4,2:INPUT " Nombre del archivo: ",NOM$
4860 IF NOM$<>"" THEN NOMRAZON$=NOM$
4870 NOMRAZ$=LEFT$(NOMRAZON$,8)+".raz"
4880 OPEN "o",#1,NOMRAZ$
4890 WRITE #1,NR
4900 FOR I=1 TO NR
4910 WRITE #1,R$(I)
4920 NEXT I
4930 CLOSE #1
4940 CLS
4950 RETURN
4960 REM ** Inversión de colores de pantalla con F2 ***
4970 INV=INV+1
4980 IF INV MOD 2 = 1 THEN PALETTE 7,0:COLOR 7,63:CL=63:GOSUB
5000 ELSE PALETTE 7,7:COLOR 7,0:CL=0:GOSUB 5000
4990 RETURN
5000 IF INVG MOD 2 = 1 THEN PALETTE 12,CL
5010 IF INVB MOD 2 = 1 THEN PALETTE 9,CL
5020 IF INVP MOD 2 = 1 THEN PALETTE 2,CL
5030 IF INVE MOD 2 = 1 THEN PALETTE 4,CL
5040 IF INVC MOD 2 = 1 THEN PALETTE 14,CL
5050 RETURN
5060 IF INV MOD 2 = 1 THEN CL=63 ELSE CL=0
5070 RETURN
5080 REM ** Presentación-ocultamiento puntos auxiliares **

```

```

5090 INVP=INVP+1
5100 GOSUB 5060
5110 IF INVP MOD 2 = 1 THEN PALETTE 2,CL ELSE PALETTE 2,2
5120 RETURN
5130 REM ** Presentación-ocultamiento bandas **
5140 INVB=INVB+1
5150 GOSUB 5060
5160 IF INVB MOD 2 = 1 THEN PALETTE 9,CL ELSE PALETTE 9,9
5170 RETURN
5180 REM ** Presentación-ocultamiento gráfico principal **
5190 INVG=INVG+1
5200 GOSUB 5060
5210 IF INVG MOD 2 = 1 THEN PALETTE 12,CL ELSE PALETTE 12,36
5220 RETURN
5230 REM ** Presentación-ocultamiento barras de error **
5240 INVE=INVE+1
5250 GOSUB 5060
5260 IF INVE MOD 2 = 1 THEN PALETTE 4,CL ELSE PALETTE 4,2
5270 RETURN
5280 REM ** Activa-desactiva barra de menú **
5290 ONOFF=ONOFF+1
5300 IF ONOFF MOD 2 = 1 THEN KEY OFF ELSE KEY ON
5310 RETURN
5320 REM ** Sobreimpresión del continuo **
5330 KEY OFF
5340 IF NCC=0 THEN PCOPY 0,1:CLS 0:GOTO 5400 ELSE GOSUB 5360
5350 GOTO 5510
5360 INVC=INVC+1:LOCATE 1,40
5370 GOSUB 5060
5380 IF INVC MOD 2 = 1 THEN PRINT SPC(25):PALETTE 14,CL ELSE
PALETTE 14,6:PRINT "Continuo: ";NOMCONT$
5390 RETURN
5400 LOCATE 3,8:PRINT "CONTINUO"
5410 PRINT:PRINT:SHELL "dir *.con/w"
5420 LOCATE 18,2:INPUT "Nombre del continuo";NOMCONT$
5430 OPEN "i",#1,NOMCONT$
5440 INPUT #1,NCC:ERASE XC,YC:DIM XC(NCC),YC(NCC)
5450 FOR J=1 TO NCC:INPUT #1,XC(J),YC(J):NEXT J:CLOSE #1

```

```

5460 CLS 1:CLS 2:PCOPY 1,0:LOCATE 1,40:PRINT "Continuo. ";NOMCONT$
5470 FOR J=2 TO NCC
5480 YCP1#=FNCY#(YC(J-1)):YCP2#=FNCY#(YC(J))
5490 LINE (XC(J-1),YCP1#)-(XC(J),YCP2#),14,,&HCCCC
5500 NEXT J
5510 KEY ON:RETURN
5520 REM *** IMPRIMIR VALORES DE LA EFICIENCIA ***
5530 CLS
5540 LOCATE 2,10:PRINT "VALORES DE LA EFICIENCIA"
5550 LOCATE 5,4:PRINT "1. Rango de valores."
5560 LOCATE 7,4:PRINT "2. Razón de valores."
5570 LOCATE 9,4:PRINT "3. Volver."
5580 LOCATE 11,4:INPUT "Elija opción: ",OP%
5590 IF OP%=3 THEN RETURN
5600 ON OP% GOSUB 5620,5750
5610 GOTO 5530
5620 CLS
5630 INPUT "Valores (l.d.o. inicial, l.d.o. final): ";LDOI,LDOF
5640 INPUT "Número de puntos? ",PTOS
5650 CLS:PASO=INT((LDOF-LDOI)/PTOS)
5660 PRINT:PRINT " L.d.o (";CHR$(143);")","EFICIENCIA"
5670 FOR I=LDOI TO LDOF STEP PASO
5680 EF=FNEF#(I)
5690 PRINT " ";I,EF
5700 NEXT
5710 KEY (2) ON
5720 WHILE INKEY$="":WEND
5730 KEY (2) OFF
5740 RETURN
5750 CLS:INPUT "Razón = ",RAZON$
5760 BARRA=INSTR(RAZON$,"/")
5770 RAZON1=VAL(LEFT$(RAZON$,BARRA-1))
5780 RAZON2=VAL(RIGHT$(RAZON$,LEN(RAZON$)-BARRA))
5790 RAZON=FNEF#(RAZON1,0)/FNEF#(RAZON2,0)
5800 ERAZ=ABS(FNEF#(RAZON1,1)/FNEF#(RAZON2,1)-
FNEF#(RAZON1,2)/FNEF#(RAZON2,2))/2
5810 PRINT:PRINT "Razón de eficiencias = ";RAZON;"ñ";ERAZ
5820 KEY (2) ON

```

```

5830 WHILE INKEY$="":WEND
5840 KEY (2) OFF
5850 RETURN
5860 REM *** Pinta la malla del papel logaritmico con F3 ***
5870 REM ** Malla horizontal **
5880 FOR DEC=1 TO NDEC
5890 FOR MALLA=2 TO 10
5900 YMALLA=FNCY#(MALLA*10^(-DEC)):PUT (X1-
HX+2*QX,YMALLA),HORIZONTAL
5910 NEXT MALLA,DEC
5920 REM ** Malla vertical **
5930 FIN=(XNUM-X1)/HX+1
5940 FOR MALLA=0 TO FIN
5950 XMALLA=X1+HX*MALLA:PUT (XMALLA,1/60),VERTICAL
5960 NEXT MALLA
5970 RETURN

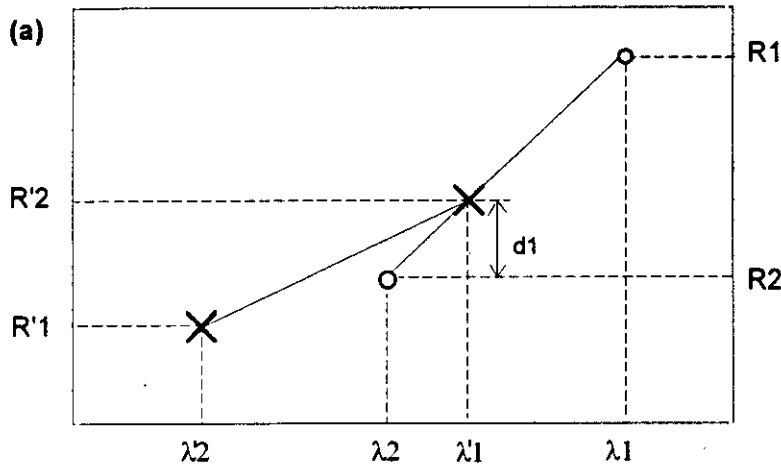
```

A3. PROGRAMA SATO

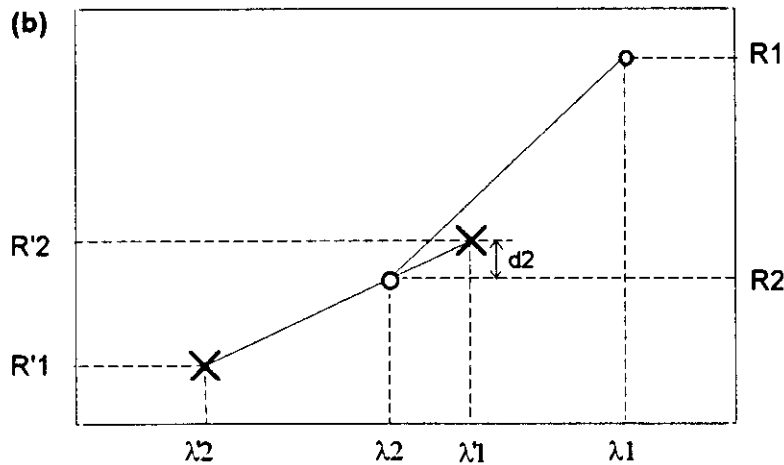
Este programa representa gráficamente la reconstrucción de la función eficiencia de nuestro sistema espectrométrico a partir de datos de razones de ramificación de eficiencia, mediante el método de interpolación-extrapolación lineal que a continuación se explica. Los puntos que se obtienen se representan en escala logarítmica normalizada a la unidad.

En primera aproximación podemos reconstruir la función eficiencia mediante el método utilizado por Sato^{4,5}.

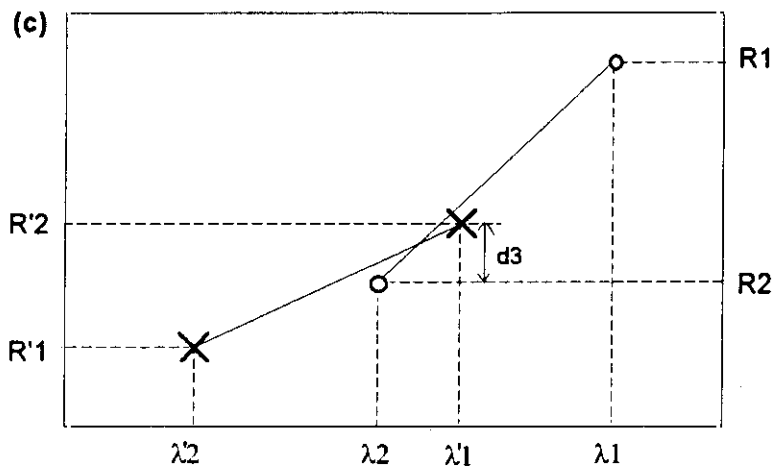
Para encajar dos razones adyacentes tenemos tres posibilidades, considerando $\lambda_1 > \lambda_2, \lambda'_1 > \lambda'_2$:



$$d_1 = \frac{R_1 - R_2}{\lambda_1 - \lambda_2} (\lambda'_1 - \lambda_2)$$



$$d_2 = \frac{R'_1 - R'_2}{\lambda'_1 - \lambda'_2} (\lambda_1 - \lambda_2)$$



$$d_3 = R'_1 - R_2 = \frac{d_1 + d_2}{2}$$

Considerando el promedio d_3 , podemos ir encajando consecutivamente todas las razones para reconstruir la función eficiencia. Se ha elaborado un programa de ordenador que utiliza este método (Cfr. Apénd.A3). Para verificar la validez del mismo se han reproducido las curvas de eficiencia dadas por otros autores como Sato^{4.5}, Cunningham^{4.3} y Bukow^{4.4}, obteniéndose resultados idénticos.

```

10 REM *****
20 REM *** RAZONES DE RAMIFICACIÓN *** Versión 4.0 *****
30 REM *****
40 REM ***** por Juan Luis González-Santander *** 1996 *****
50 REM *****
60 CLS: CLEAR: KEY OFF: SCREEN 9: F#= .4342944819#
70 COLOR 7,0
80 ON ERROR GOTO 2850
90 ON KEY(2) GOSUB 3050: REM ** Define f2 = Invertir colores, para imprimir
**
100 ON KEY(3) GOSUB 3090: REM ** Define f3 = Malla logarítmica **
110 ON KEY(4) GOSUB 3660: REM ** Define f4 = Activa/Desactiva menú **
120 ON KEY(7) GOSUB 3210: REM ** Define f7 = Valores de la eficiencia **
130 KEY (2) OFF: KEY (3) OFF: KEY (7) OFF: KEY (4) OFF: KEY OFF
140 KEY 1, " ---": KEY 2, " Inv.C": KEY 3, " Malla": KEY 4, " On/off": KEY 5, " ---"
150 KEY 6, " ---": KEY 7, " Val": KEY 8, " ---": KEY 9, " ---": KEY 10, " ---"
160 DIM HORIZONTAL(500), VERTICAL(500)
170 DIM R$(10)
180 LOCATE 3,18: PRINT "*** CÁLCULO DE LA EFICIENCIA RELATIVA ***"

```

```

190 LOCATE 4,18:PRINT "*** DE UN ESPECTRÓMETRO EN EL U.V.V. ***"
200 LOCATE 5,18:PRINT "*** MEDIANTE RAZONES DE RAMIFICACIÓN ***"
210 LOCATE 6,18:PRINT "*** Interpolación-extrapolación lineal ***"
220 REM
230 REM ** MENÚ PRINCIPAL **
240 REM
250 LOCATE 9,15:PRINT "1. Introducir razones."
260 LOCATE 11,15:PRINT "2. Leer razones."
270 LOCATE 13,15:PRINT "3. Salir."
280 LOCATE 15,15:INPUT "Elija opción: ",OP%
290 IF OP%=1 THEN GOSUB 2650:GOTO 330
300 IF OP%=2 THEN GOSUB 2420:GOTO 330
310 IF OP%=3 THEN CLS:SYSTEM
320 GOTO 280
330 DIM LDO(N),R(NR),RLDO(NR,2)
340 DIM Y(NR,2),YP(2*NR)
350 REM *** INTERPRETACIÓN DE DATOS ***
360 DEF FNPART(I,X,Y)=VAL(MID$(R$(I),X+1,Y-X-1))
370 FOR I=1 TO NR
380 R$(I)=R$(I)
390 S1=0:S2=0:S3=0
400 S1=INSTR(R$(I),"/")
410 S2=INSTR(R$(I),"=")
420 S3=LEN(R$(I))+1
430 RLDO(I,1)=FNPART(I,0,S1)
440 RLDO(I,2)=FNPART(I,S1,S2)
450 R(I)=FNPART(I,S2,S3)
460 NEXT I
470 REM *** L.D.O. máxima y mínima ***
480 FOR I=0 TO NR-1
490 FOR J=1 TO 2
500 LDO(2*I+J)=RLDO(I+1,J)
510 NEXT J,I
520 FOR K=1 TO N-1
530 FOR L=K+1 TO N
540 IF LDO(K)>LDO(L) THEN SWAP LDO(K),LDO(L)
550 NEXT L,K
560 MINLDO=LDO(1):MAXLDO=LDO(N)

```

```

570 REM *** CALCULO DE LOS PUNTOS ***
580 Y(1,1)=100:Y(1,2)=Y(1,1)/R(1)
590 FOR I=1 TO NR-1
600 M1=(RLDO(I+1,1)-RLDO(I,1))/(RLDO(I,2)-RLDO(I,1))
610 M2=(RLDO(I+1,2)-RLDO(I,2))/(RLDO(I+1,2)-RLDO(I+1,1))
620 Y1=Y(I,1)*((1/R(I)-1)*M1+1)
630 Y2=Y(I,2)/(1/R(I+1)-(1/R(I+1)-1)*M2)
640 Y(I+1,1)=(Y1+Y2)/2
650 Y(I+1,2)=Y(I+1,1)/R(I+1)
660 NEXT I
670 REM *** NORMALIZACIÓN ***
680 MAX=0
690 FOR I=1 TO NR
700 FOR L=1 TO 2
710 IF Y(I,L)>MAX THEN MAX=Y(I,L)
720 NEXT L,I
730 FOR I=1 TO NR
740 FOR L=1 TO 2
750 Y(I,L)=Y(I,L)/MAX
760 NEXT L,I
770 REM ** Puntos X-Y de la gráfica para construir la poligonal **
780 FOR K=1 TO 2*NR
790 FOR I=1 TO NR
800 FOR L=1 TO 2
810 IF LDO(K)=RLDO(I,L) THEN YP(K)=Y(I,L):I=NR:L=2
820 NEXT L,I
830 NEXT K
840 REM ** Definición de la función de interpolación **
850 DEF FNINTERPOL(X,N)=(YP(N+1)-YP(N))*(X-LDO(N))/(LDO(N+1)-LDO(N))+YP(N)
860 REM ** REPRESENTACIÓN GRÁFICA **
870 REM
880 REM ** ELECCIÓN DE ESCALA **
890 CLS
900 LOCATE 3,25:PRINT "ELECCIÓN DE ESCALA"
910 LOCATE 5,20:PRINT "1. Elección automática"
920 LOCATE 7,20:PRINT "2. Elección manual"
930 LOCATE 9,20:INPUT "Elija opción: ",OP

```



```

940 ON OP GOSUB 960,1030
950 GOTO 1190
960 X1=INT(MINLDO/50)*50:XN=INT(MAXLDO/50+1)*50
970 X1=INT(MINLDO/50)*50:XN=INT(MAXLDO/50+1)*50
980 EFMIN1=Y(1,1):EFMIN2=Y(NR,2)
990 IF EFMIN1>EFMIN2 THEN EFMIN=EFMIN2 ELSE EFMIN=EFMIN1
1000 IF EFMIN>.1 THEN NDEC=1:GOTO 1020
1010 IF EFMIN<.1 AND EFMIN>.01 THEN NDEC=2 ELSE NDEC=3
1020 RETURN
1030 X1I=X1:XNI=XN:LOCATE 22,10:PRINT "Enter = última elección"
1040 LOCATE 13,4:PRINT "EJE DE ABSCISAS en ";CHR$(143)
1050 LOCATE 15,1:PRINT "Margen izquierdo:";X1;CHR$(143)
1060 PRINT "Margen derecho:";XN;CHR$(143)
1070 PRINT:INPUT "Introduzca margen izquierdo:";X1
1080 IF X1=0 THEN X1=X1I
1090 INPUT "Introduzca margen derecho:";XN
1100 IF XN=0 THEN XN=XNI
1110 NDECI=NDEC
1120 LOCATE 13,34:PRINT "EJE DE ORDENADAS (escala logarítmica)"
1130 LOCATE 15,32:PRINT "Número de décadas:";NDEC
1140 LOCATE 16,32:INPUT "Introduzca nº de décadas (1-3): ";NDEC
1150 NDEC=INT(NDEC)
1160 IF NDEC=0 THEN NDEC=NDECI
1170 IF NDEC>3 OR NDEC<1 THEN GOTO 2520
1180 CLS:RETURN
1190 REM * Nombre del archivo **
1200 CLS
1210 LOCATE 1,5:PRINT "Razones: ";NOMRAZON$
1220 REM ** Eje ordenadas **
1230 LOCATE 2,2:PRINT "1"
1240 IF NDEC=2 THEN LOCATE 12,1:PRINT ".1"
1250 IF NDEC=3 THEN LOCATE 9,1:PRINT ".1":LOCATE 15,1:PRINT ".01"
1260 REM ** Eje abscisas **
1270 RECX=ABS(X1-XN):HX=INT(RECX/200+.5)*50
1280 IF RECX/HX>4 THEN S=7.5:RS=S-.6:SS=8 ELSE S=15:RS=S-4:SS=14
1290 NUM=-1:XNUM=0
1300 WHILE XNUM<XN
1310 NUM=NUM+1

```

```

1320 XNUM=X1+HX*NUM
1330 LOCATE 23,INT(RS*NUM)+SS:PRINT XNUM
1340 WEND
1350 LOCATE 23,INT(RS*NUM)+SS+12:PRINT CHR$(143)
1360 NCANAL=8*S*NUM
1370 ACH#=ABS(X1-XNUM)/NCANAL:REM * Angstrom por canal *
1380 QX=HX/40
1390 DEF FNCY#(X)=1+(F#*LOG(X))/NDEC
1400 VIEW (25,6)-(95+NCANAL,300)
1410 WINDOW (X1-HX,0)-(XNUM+HX,1.05)
1420 REM *** Define las matrices de malla ***
1430 LINE (XNUM+HX,0)-(X1-HX+2*QX,0),,,&HCCCC
1440 GET (XNUM+HX,0)-(X1-HX+2*QX,0),HORIZONTAL
1450 LINE (X1-HX,1/60)-(X1-HX,1),,,&HCCCC
1460 GET (X1-HX,1/60)-(X1-HX,1),VERTICAL
1470 REM *** Pinta los ejes ***
1480 LINE (XNUM+HX,0)-(X1-HX,0)
1490 LINE -(X1-HX,1)
1500 FOR XRAYA=0 TO 9
1510 XR=X1+HX*XRAYA
1520 LINE (XR,0)-(XR,1/60)
1530 NEXT XRAYA
1540 FOR DEC=1 TO NDEC
1550 FOR YRAYA=1 TO 10
1560 YR=FNCY#(YRAYA*10^(-DEC)):LINE (X1-HX,YR)-(X1-HX+2*QX,YR)
1570 NEXT YRAYA,DEC
1580 REM *** PINTA LOS PUNTOS ***
1590 FOR I=1 TO NR
1600 FOR L=1 TO 2
1610 IF Y(I,L)<0 THEN BEEP:GOTO 1650
1620 XP=RLDO(I,L):YP#=FNCY#(Y(I,L))
1630 LINE (XP-QX,YP#-1/80)-(XP+QX,YP#+1/80),2
1640 LINE (XP-QX,YP#+1/80)-(XP+QX,YP#-1/80),2
1650 NEXT L,I
1660 KEY (2) ON:KEY (3) ON:KEY (4) ON:KEY (7) ON:KEY ON
1670 WHILE INKEY$="":WEND
1680 KEY (2) OFF:KEY (3) OFF:KEY (4) OFF:KEY (7) OFF:KEY OFF
1690 REM ** MENU DE OPCIONES **

```

```

1700 SCREEN 0,0,0:SCREEN 9:COLOR 7,0
1710 LOCATE 1,1:INPUT "Imprimir razones (s/n)";OP$
1720 IF OP$="S" OR OP$="s" THEN GOSUB 1850:CLS:GOTO 1750
1730 IF OP$="N" OR OP$="n" THEN GOTO 1750
1740 GOTO 1710
1750 PRINT:INPUT "Salvar razones (s/n)";OP$
1760 IF OP$="S" OR OP$="s" THEN GOSUB 2900:GOTO 1790
1770 IF OP$="N" OR OP$="n" THEN GOTO 1790
1780 REM ** Menú final **
1790 CLS:LOCATE 5,5:PRINT "1. Menú principal"
1800 LOCATE 7,5:PRINT "2. Editar razones"
1810 LOCATE 10,5:INPUT "Elija opción:";OP%
1820 IF OP%=1 THEN GOTO 10
1830 IF OP%=2 THEN GOSUB 1950:GOTO 350
1840 GOTO 1790
1850 REM *** IMPRESIÓN DE RAZONES ***
1860 CLS
1870 FOR I=1 TO NR
1880 PRINT " Razón nº";I;" ";R$(I)
1890 NEXT I
1900 KEY (2) ON
1910 WHILE INKEY$=""
1920 WEND
1930 KEY (2) OFF
1940 RETURN
1950 REM **** EDITOR DE RAZONES ****
1960 CLS
1970 LOCATE 1,30:PRINT "EDITOR DE RAZONES"
1980 REM ** Impresión de razones y menú **
1990 FOR I=1 TO NR
2000 IF I>12 THEN POSX=1:POSY=1 ELSE POSX=0:POSY=0
2010 LOCATE 2+I-POSX*12,4+40*POSY:PRINT I;" ";R$(I)
2020 NEXT I
2030 LOCATE 17,12:PRINT "MENÚ."
2040 LOCATE 19,6:PRINT "1. Borrar razón."
2050 LOCATE 20,6:PRINT "2. Añadir razón."
2060 LOCATE 21,6:PRINT "3. Corregir razón."
2070 LOCATE 22,6:PRINT "4. Fin."

```

```

2080 LOCATE 23,6:INPUT "Elija opción: ",OPCION%
2090 IF OPCION%>4 OR OPCION%<1 THEN GOTO 2080
2100 ON OPCION% GOTO 2110,2190,2280,2350
2110 REM ** Borrar razón **
2120 LOCATE 20,36:INPUT "Borrar razón nº: ",NB
2130 NR=NR-1
2140 FOR I=NB TO NR
2150 R$(I)=R$(I+1)
2160 NEXT I
2170 R$(NR+1)=" "
2180 GOTO 1950
2190 REM ** Añadir Razón **
2200 NR=NR+1
2210 LOCATE 20,36:INPUT "Posición nº: ",NA
2220 FOR I=NR TO NA+1 STEP -1
2230 R$(I)=R$(I-1)
2240 NEXT I
2250 LOCATE 21,36:PRINT "Razón nº";NA
2260 LOCATE 22,36:LINE INPUT R$(NA)
2270 GOTO 1950
2280 REM ** Corregir razón **
2290 LOCATE 20,36:INPUT "Corregir razón nº: ",NC
2300 SC1=INSTR(R$(NC),"=")
2310 RC$=LEFT$(R$(NC),SC1):LR=LEN(RC$)
2320 LOCATE 21,36:PRINT "Nuevo valor: ";R$(NC);LOCATE 21,49+LR:LINE
INPUT A$
2330 R$(NC)=RC$+A$
2340 GOTO 1950
2350 REM ** Fin **
2360 CLS:N=2*NR
2370 PRINT "Una vez editadas las razones:"
2380 ERASE LDO,R,RLDO,Y
2390 DIM LDO(N),R(NR),RLDO(NR,2)
2400 DIM Y(NR,2)
2410 RETURN
2420 REM *** LECTURA DE RAZONES ***
2430 CLS:LOCATE 1,15:PRINT "LECTURA DE RAZONES"
2440 ERASE R$

```

```

2450 LOCATE 3,5:PRINT "Los archivos de razones disponibles son:"
2460 SHELL "dir/w *.raz"
2470 LOCATE 18,2:INPUT "Nombre del archivo";NOMRAZON$
2480 OPEN "i",#1,NOMRAZON$
2490 NOMRAZON$=LEFT$(NOMRAZON$,LEN(NOMRAZON$)-4)
2500 INPUT #1,NR:N=2*NR
2510 DIM R$(NR+10)
2520 FOR I=1 TO NR
2530 INPUT #1,R$(I)
2540 NEXT I
2550 CLOSE #1
2560 CLS:PRINT
2570 PRINT " El archivo ";NOMRAZON$," contiene las razones:":PRINT
2580 GOSUB 1870:REM ** Impresión de razones **
2590 PRINT:PRINT "      1. Otras razones."
2600 PRINT "      2. Continuar."
2610 PRINT:INPUT "      Elija opción: ",OP%
2620 IF OP%=1 THEN GOTO 2420
2630 IF OP%=2 THEN GOTO 330
2640 GOTO 2560
2650 REM ***INTRODUCCIÓN DE RAZONES ***
2660 CLS:PRINT:PRINT
2670 PRINT " Introduzca cada razón con de este formato:"
2680 PRINT:PRINT "      L.d.o.1/L.d.o.2=razón"
2690 PRINT:PRINT " NOTA: Longitudes de onda en ";CHR$(143)
2700 PRINT:PRINT
2710 INPUT " Nombre de las razones";NOMRAZON$
2720 PRINT:INPUT " Cuántas razones va a introducir";NR
2730 ERASE R$:N=2*NR
2740 DIM R$(NR+10)
2750 CLS
2760 LOCATE 1,5:PRINT "INTRODUCCIÓN DE LAS RAZONES:":PRINT
2770 VIEW PRINT 3 TO 22
2780 FOR I=1 TO NR
2790 PRINT "Razón nº";I:LINE INPUT R$(I)
2800 PRINT
2810 NEXT I
2820 VIEW PRINT 1 TO 24

```

```

2830 RETURN
2840 REM *** Control de errores ***
2850 IF ERL=2480 THEN PRINT " El archivo de las razones no se
encuentra.":RESUME 2470
2860 IF ERL=2970 THEN PRINT " Nombre de archivo incorrecto.":RESUME
2940
2870 WHILE INKEY$=""
2880 WEND
2890 RETURN
2900 REM *** Salvar razones ***
2910 CLS:NOM$=""
2920 LOCATE 1,6:PRINT "SALVAR RAZONES"
2930 LOCATE 6,2:PRINT " Enter = nombre actual: ";NOMRAZON$
2940 LOCATE 4,2:INPUT " Nombre del archivo: ",NOM$
2950 IF NOM$<>"" THEN NOMRAZON$=NOM$
2960 NOMRAZ$=LEFT$(NOMRAZON$,8)+".raz"
2970 OPEN "o",#1,NOMRAZ$
2980 WRITE #1,NR
2990 FOR I=1 TO NR
3000 WRITE #1,R$(I)
3010 NEXT I
3020 CLOSE #1
3030 CLS
3040 RETURN
3050 REM ** Inversión de colores de pantalla con F2 ***
3060 INV=INV+1
3070 IF INV MOD 2 = 1 THEN PALETTE 7,0:COLOR 7,63 ELSE PALETTE
7,7:COLOR 7,0
3080 RETURN
3090 REM *** Pinta la malla del papel logarítmico con F3 ***
3100 REM ** Malla horizontal **
3110 FOR DEC=1 TO NDEC
3120 FOR MALLA=2 TO 10
3130 YMALLA=FNCY#(MALLA*10^(-DEC)):PUT (X1-
HX+2*QX,YMALLA),HORIZONTAL
3140 NEXT MALLA,DEC
3150 REM ** Malla vertical **
3160 FIN=(XNUM-X1)/HX+1

```

```

3170 FOR MALLA=0 TO FIN
3180 XMALLA=X1+HX*MALLA:PUT (XMALLA,1/60),VERTICAL
3190 NEXT MALLA
3200 RETURN
3210 REM *** IMPRIMIR VALORES DE LA EFICIENCIA ***
3220 PCOPY 0,1
3230 CLS 1:CLS 2
3240 LOCATE 2,10:PRINT "VALORES DE LA EFICIENCIA"
3250 LOCATE 5,4:PRINT "1. Rango de valores."
3260 LOCATE 7,4:PRINT "2. Razón de valores."
3270 LOCATE 9,4:PRINT "3. Volver."
3280 LOCATE 11,4:INPUT "Elija opción: ",OP%
3290 IF OP%=3 THEN CLS 1:CLS 2:PCOPY 1,0:RETURN
3300 ON OP% GOSUB 3320,3460
3310 GOTO 3230
3320 CLS 1:CLS 2
3330 INPUT "Valores (l.d.o. inicial, l.d.o. final): ",LDOI,LDOF
3340 INPUT "Número de puntos? ",PTOS
3350 CLS 1:CLS 2:PASO=INT((LDOF-LDOI)/(PTOS-1))
3360 PRINT:PRINT " L.d.o (";CHR$(143);")", "EFICIENCIA"
3370 FOR I=LDOI TO LDOF STEP PASO
3380 X=I:GOSUB 3590:EF=Z:REM * Calcula valor de la eficiencia interpolando
*
3390 PRINT " ";I,EF
3400 NEXT
3410 KEY (2) ON
3420 WHILE INKEY$="":WEND
3430 KEY (2) OFF
3440 CLS 1:CLS 2
3450 RETURN
3460 CLS 1:CLS 2:INPUT "Razón = ",RAZON$
3470 BARRA=INSTR(RAZON$,"/")
3480 RAZON1=VAL(LEFT$(RAZON$,BARRA-1))
3490 RAZON2=VAL(RIGHT$(RAZON$,LEN(RAZON$)-BARRA))
3500 X=RAZON1:GOSUB 3590:VAL1=Z
3510 X=RAZON2:GOSUB 3590:VAL2=Z
3520 RAZON=VAL1/VAL2
3530 PRINT:PRINT "Razón de eficiencias = ";RAZON

```

```
3540 KEY (2) ON
3550 WHILE INKEY$="":WEND
3560 KEY (2) OFF
3570 CLS 1:CLS 2
3580 RETURN
3590 REM ** Rutina que halla valores de la eficiencia de la poligonal **
3600 IND=1
3610 WHILE X>LDO(IND)
3620 IND=IND+1
3630 WEND
3640 Z=FNINTERPOL(X,IND-1)
3650 RETURN
3660 REM *** Activa-Desactiva menú de teclas de función ***
3670 CONTADOR=CONTADOR+1
3680 IF CONTADOR MOD 2 = 1 THEN KEY OFF ELSE KEY ON
3690 RETURN
```


B. COMUNICACIONES EN CONGRESOS

1. **26th EGAS Conference**
12-15 Julio 1994.
Universidad Autónoma de Barcelona. (Bellaterra).
2. **XIV Reunión Nacional de Espectroscopía**
Grupo Español de Espectroscopía. CSIC.
18-23 Septiembre 1994.
Baeza (Jaén).
3. **XXV Bienal de la Real Sociedad Española de Física**
25-29 Septiembre 1995.
Santiago de Compostela.
4. **XV Reunión Nacional de Espectroscopía**
Grupo Español de Espectroscopía. CSIC.
15-20 Septiembre 1996.
Oviedo.
5. **XXVI Bienal de la Real Sociedad Española de Física**
22-26 Septiembre 1997
Las Palmas de Gran Canaria.

3m VACUUM ULTRAVIOLET SPECTROMETER WITH OPTICAL MULTICHANNEL DETECTOR. EMISSION OF IONIZED ALUMINIUM IN THE 300 Å SPECTRAL REGION

P. Martín, J. L. G. Santander y J. Campos*

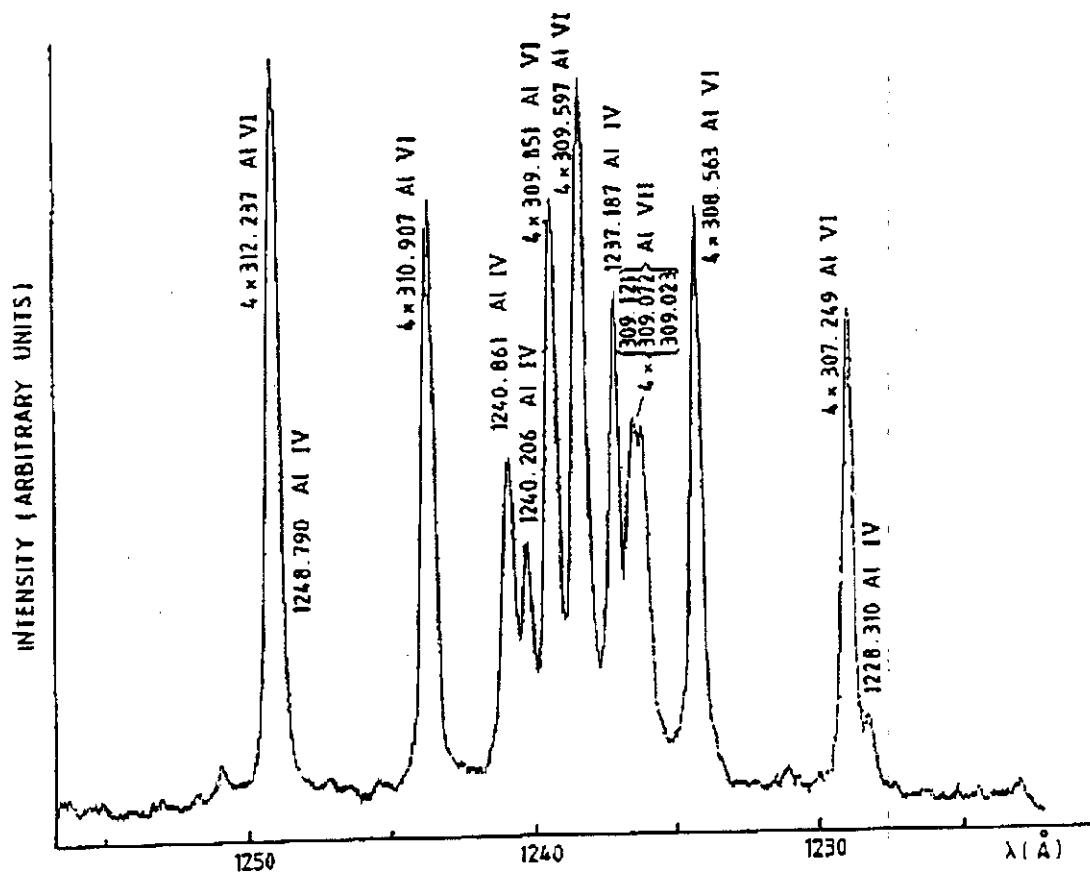
Unidad de Física Atómica y Estado Sólido. Investigación Básica. CIEMAT.
Avda. Complutense 22. Madrid 28040.

* Cátedra de Física Atómica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense. Ciudad Universitaria. Madrid 28040.

The design and performance of a normal incidence vacuum ultraviolet spectrometer for 240-2000 Å spectral range is described. The monochromator is equipped with a Pt-coated 3m concave holographic grating of 2400 grooves/mm. It has been employed a multichannel detector system, which consists of a windowless double microchannel plate and phosphor screen image intensifier (Galileo 3025-FM) couple by fiber optic to a 1024 elements self-scanning linear photodiode array (EG&G Reticon RL1024SAF and evaluation circuits RC1000/RC1001). The output from the array is digitized by an ADC and stored on a computer, for its later analysis. Resolution was 0.05 Å in fifth order with 100 µm entrance slit.

With this spectrometric system, emission spectra of an Al-plasma produced by a 0.3 J Q-switch Nd:YAG laser have been obtained. The laser beam is focused onto the target (normal to the surface) inside a vacuum chamber. The light emitted from the plasma was viewed normal to its main expansion direction at a distance of 20 cm from the entrance slit. Spectra were detected at different distances from the target surface and different irradiance values. A typical spectrum section is shown in fig 1, where Al VI and Al VII lines in the fourth spectral order can be seen.

To identify the transitions the tables of R. L. Kelly (1) and V. Kaufman and C. Martin (2) have been used. Transition probabilities for lines arising from the lower lying levels of Al VI and Al VII have been measured. Comparison with theoretical results of B. C. Fawcett (3) and E. Biémont (4) has been made.



1. R. L. Kelly, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **16**, Suppl. 1 (1987).
2. V. Kaufmann and W. C. Martin, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **20**, 775 (1991).
3. B. C. Fawcett, *Atomic Data and Nucl. Data Tables*, **34**, 215 (1986).
4. E. Biémont, *Atomic Data and Nucl. Data Tables*, **48**, 1 (1991).

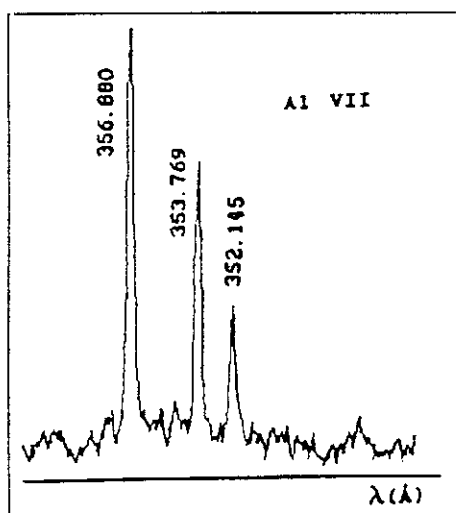
ESPECTROSCOPIA DE ULTRAVIOLETA DE VACÍO DE UN PLASMA PRODUCIDO POR LÁSER

P. Martín, J. L. G. Santander y J. Campos*

Unidad de Física Atómica y Estado Sólido. Investigación Básica. CIEMAT.
Avda. Complutense 22. Madrid 28040.

* Cátedra de Física Atómica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad
Complutense. Ciudad Universitaria. Madrid 28040.

Para el estudio del espectro de átomos ionizados, los plasmas producidos por láser constituyen una buena fuente de radiación. En el presente trabajo, para producir un plasma de Al, se ha utilizado un láser de Nd:YAG que proporciona impulsos de 350 mJ y 7 ns de duración, enfocando sobre la muestra de Al situada en una cámara de vacío a una presión $<10^{-5}$ Torr. La radiación emitida por el plasma es analizada en la dirección perpendicular a la expansión de dicho plasma, a 13 cm de la rendija de entrada de 100 μm , de un espectrómetro de ultravioleta de vacío de 3m provisto de un sistema de detección óptica multicanal.



Se han determinado las probabilidades de transición de líneas resonantes del Al VI y Al VII que parten de niveles $2s2p^5\ ^3P$ y $2s2p^4\ ^4P$ respectivamente. Las medidas de intensidades de líneas se han realizado con irradiancias de $2 \cdot 10^9\ \text{W}/\text{cm}^2$, ya que para mayores irradiancias se tenía autoabsorción como era esperado. Los valores obtenidos se comparan con los cálculos existentes en la bibliografía (1), (2). En la figura se presenta uno de los espectros

obtenidos de Al VII.

1. B. C. Fawcett, *Atomic Data and Nucl. Data Tables*, **34**, 215 (1986).
2. E. Biémont, *Atomic Data and Nucl. Data Tables*, **48**, 1 (1991).

ESTUDIOS DE ABSORCIÓN ATÓMICA EN PLASMAS PRODUCIDO POR LASER.

A.M. González, J.L.G. Santander, M. Ortiz y J. Campos *

Física Atómica y Lasers. Instituto de Investigación Básica. CIEMAT
Cátedra de Física Atómica Experimental. Facultad de Ciencias Físicas.
Universidad Complutense de Madrid.
Ciudad Universitaria. 28040. Madrid.

Como es bien sabido una de las aplicaciones de la espectroscopia de ruptura inducida por laser es la determinación del contenido de elementos en materiales sólidos (1). En trabajos anteriores del laboratorio se han hecho ensayos de precisión y límite de detección de componentes de interés en aceros como son el carbono y el azufre (2,3). En este trabajo se presenta un sistema que permite la determinación de elementos presentes en una muestra mediante absorción atómica utilizando el vapor de un plasma producido por laser.

El sistema experimental está compuesto por una cámara que contiene la muestra en estado sólido. La cámara está conectada a un sistema de vacío convencional y permite realizar medidas tanto en vacío como en distintos tipos de atmósfera. Un laser de Nd-YAG (10 Hz de frecuencia, 7 ns de duración del impulso y 300 mJ de energía) se enfoca sobre la muestra produciendo la vaporización de la misma. La luz procedente de una lámpara de cátodo hueco conteniendo el elemento que se quiere determinar atraviesa la cámara en la que se encuentra el vapor. Un monocromador selecciona la longitud de onda de una transición característica del elemento en estudio y se acopla a un fotomultiplicador (Philips 56 UVP). La salida de este se lleva un osciloscopio digital que sincronizado con el disparo del laser registra la señal correspondiente a la absorción experimentada por la luz de la lámpara.

Un segundo fotomultiplicador recibe parte de la luz de la lámpara a la salida de la cámara mediante un divisor de haz. De esta forma se normalizan las medidas teniendo en cuenta la posibilidad de disminución en la emisión de la lámpara por motivos diferentes a la absorción por el elemento de interés.

Se han realizado medidas en antimonio utilizando aleaciones de estaño-antimonio a distintas concentraciones realizadas en un horno de inducción. Las medidas se han llevado a cabo tanto en vacío (10 torr) como en

distintas atmósferas (aire, argon, etc). También se ha tenido en cuenta la influencia en los resultados de otros parámetros como el enfoque del laser, la distancia de la muestra al centro de la cámara que es por donde atraviesa la luz de la lámpara etc.

Debido a que en los primeros microsegundos de la formación del plasma existe una fuerte emisión de luz procedente de éste que puede enmascarar la absorción, se realizaron estudios previos de emisión del plasma de antimonio, utilizándose las aleaciones anteriormente mencionadas. El sistema experimental está formado por un laser de Nd-YAG, un monocromador y un Analizador Óptico Multicanal (OMAI) como detector, con una resolución de 0,3 Å. Se seleccionó la línea de 2311 Å del Sb I por ser una transición resonante y que aparece aislada dentro de la resolución en la que luego se realizan las medidas de absorción.

BIBLIOGRAFÍA.

- (1) S.S. Darke y J. F. Tyson, J. Anal. Atomic Spectrom. **8**, 145 (1993)
- (2) C. Aragón, J.A. Aguilera, y J. Campos. Appl. Spectrosc. **47**, 667 (1993).
- (3) A. M González, M. Ortiz and J. Campos. Appl Spectrosc (en prensa).

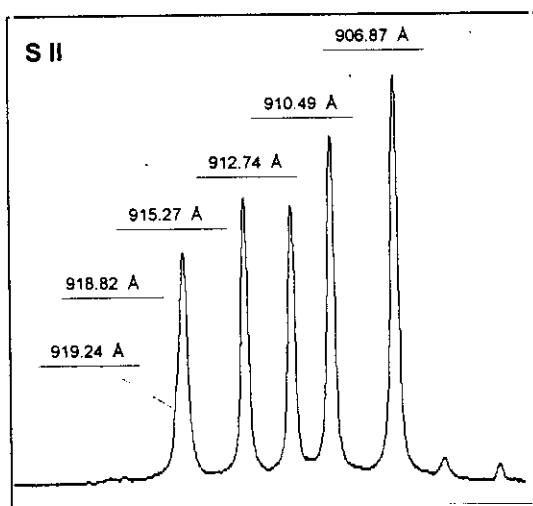
ESTUDIO DE AZUFRE IONIZADO EN LA REGIÓN DEL ULTRAVIOLETA DE VACÍO, MEDIANTE PLASMAS GENERADOS POR LÁSER

P. Martín, J. L. G. Santander y J. Campos*

Instituto de Investigación Básica. CIEMAT. Avda. Complutense 22. Madrid 28040.

* Cátedra de Física Atómica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.
Ciudad Universitaria. Madrid 28040.

Las líneas más intensas de la mayoría de los iones se encuentran en la región del ultravioleta de vacío. En la bibliografía hay muy pocos datos, tanto experimentales como teóricos, sobre las probabilidades de transición de azufre ionizado S II, existiendo discrepancias entre ambos valores para algunos casos. Recientemente se ha publicado (1) una nueva compilación de niveles de energía y longitudes de onda de azufre, con la cual será posible determinar nuevas razones de probabilidades de transición y comparar con los cálculos teóricos para estimar la bondad de las aproximaciones realizadas.



Los plasmas producidos por láser son una buena fuente de radiación para el estudio de átomos ionizados. En el presente trabajo se han obtenido espectros de emisión de un plasma de ZnS en el margen entre 700 y 1125 Å. El plasma se ha producido al enfocar un láser de Nd:YAG que produce impulsos de 7 ns de duración y 0.35 J de energía máxima, a una frecuencia de 3.2 Hz, sobre una muestra de material situada en una cámara de vacío a una presión <

10^{-5} Torr. La muestra se encuentra girando para evitar la formación de cráter. La radiación emitida por el plasma es analizada en la dirección perpendicular a la expansión de dicho plasma mediante un espectrómetro de incidencia normal de 3m, provisto de un intensificador de imagen y un detector óptico multicanal. Los espectros se han obtenido a diferentes irradiancias del láser y a diferentes distancias de la superficie de la muestra. Un ejemplo de los espectros se puede ver en la figura. Se han determinado razones de probabilidades de

transición de S II con origen en el mismo nivel superior y se han comparado con los valores existentes (2), (3).

REFERENCIAS

1. V. Kaufmann and W. C. Martin, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **22**, 279 (1993).
2. Yang and A. J. Cunningham, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **49**, 53 (1993).
3. Y. K. Ho and R. J. W. Henry, *Phys. Scripta* **35**, 831 (1987).

DETERMINACIÓN DE PROBABILIDADES DE TRANSICIÓN DE S II POR LA EMISIÓN DE PLASMAS PRODUCIDOS POR LASER.

J.Manrique,J.A.M.Rojas,S.T.de Graaff ,J.L.G. Santander,P.Martin,J.Campos.

Cátedra de Física Atómica.Facultad de Ciencias Físicas.Universidad Complutense de Madrid.

Avda Complutense S/N,28040 Madrid.

Faculty of Physics and Astronomy, Free University, De Boelelaan 1081, 1081 HV Amsterdam, The Netherlands.

Se han estudiado probabilidades de transición y parámetros de ensanchamiento de líneas de S II.

El procedimiento de excitación ha sido el de plasmas producidos por láser. Estos plasmas son producidos al enfocar un láser de potencia sobre una muestra. Como consecuencia se evapora material de ésta conteniendo gran número de especies iónicas, átomos neutros y electrones. El plasma así formado se expande rápidamente y alcanza una alta temperatura (ver figura 1) pudiendo ser utilizado como fuente espectroscópica de alto poder emisor [1].

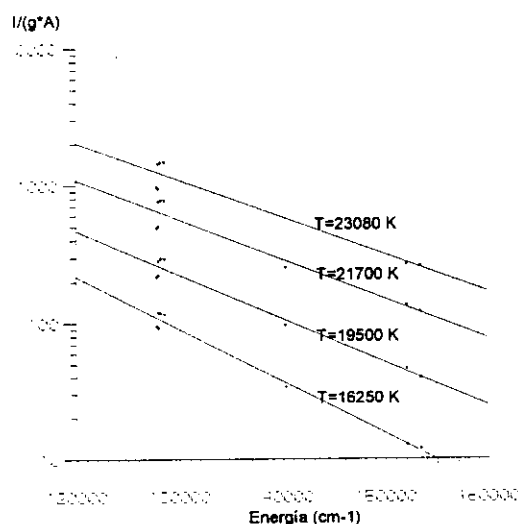


Figura 1.Determinación de la temperatura del plasma con un gráfico de Boltzman, para un retraso de 300,500,700 y 900 ns

En este experimento se ha enfocado un laser de Nd-Yag que genera impulsos de 290 mJ y 7 ns de duración sobre una muestra de ZnS situada dentro de una cámara de vacío en una atmósfera inerte de Ar cuya presión era seleccionable. Se observó la emisión de líneas de S II en el rango 3000-6000 \AA con un espectrómetro de 1 m. y un analizador óptico multicanal con resolución temporal (ver figura 2). Para obtener mayor precisión en las medidas se ha estudiado la evolución temporal y espacial del plasma y se ha determinado el comportamiento de sus parámetros en la zona interna de éste realizando la inversión de Abel de la intensidad de luz emitida.

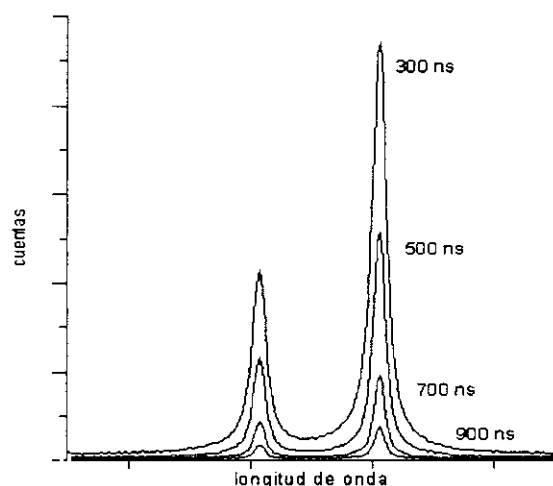


Figura 2. Muestra de un espectro con resolución temporal

De esta forma se han medido razones de ramificación para 50 líneas. Las probabilidades de transición han sido puestas en escala absoluta usando reglas de suma.

También se han realizado cálculos en acoplamiento intermedio obteniéndose buen acuerdo entre los resultados experimentales y teóricos [2] , [3]. Además se han obtenido los parámetros de ensanchamiento de las líneas relacionando sus anchuras con la de otra cuyo parámetro era bien conocido [4] como se puede ver en la figura 3.

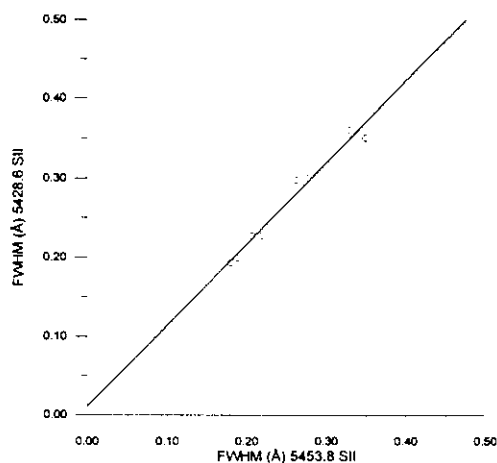


Figura 3

- [1] W.Demtröder,W.Jantz,*Plasma Physics*,**12** (1969) 691-703
- [2] M.H.Miller,T.D.Wilkerson,R.A Roig,*Physical Review A*,**9** (1973) 2312-2323
- [3] M.Aymar,*Physica*,**66** (1972) 364-379
- [4] R.Kobilarov,N.Konjevic,*Physical Review A*,**41** (1990) 6023-6031

C. PUBLICACIONES

1. P. Martín, J. L. G. Santander, and J. Campos. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **57**, 459 (1997).



LINE RATIO VALUES FOR SPECTRAL CALIBRATION IN THE VACUUM ULTRAVIOLET BY USING LASER PRODUCED PLASMAS

P. MARTÍN,^a J. L. G. SANTANDER,^a and J. CAMPOS^{b†}

^aInstituto Investigación Básica, CIEMAT, Avda. Complutense 22, 28040 Madrid and

^bCátedra de Física Atómica, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense, Ciudad Universitaria, 28040 Madrid, Spain

(Received 12 September 1996)

Abstract—Relative efficiency of a 3 m normal incidence vacuum ultraviolet monochromator has been determined for the 38.6–133.7 nm spectral range, by using the line ratio method. Emission line intensities of line pairs with a common upper level of ionized oxygen, nitrogen, carbon, sulfur and aluminum, have been measured. A laser produced plasma of different materials (ceramics, polyethylene, zinc sulfide and aluminum) has been used as light source. Values of line ratios used for calibration of the relative spectral efficiency have been discussed. Also, the efficiency has been obtained by using the continuum spectrum of a laser-produced tungsten plasma. The results of both methods are in good agreement. © 1997 Elsevier Science Ltd.

1. INTRODUCTION

The strongest radiations from most atoms and practically all ions are emitted in the vacuum ultraviolet (v.u.v.), line ratio measurements in this region are of considerable importance in plasma physics and astrophysics. To compare spectral line intensities at different wavelengths, it is necessary to know the relative efficiency of our spectrometric system. Nevertheless difficulties to calibrate spectrometers in the vacuum ultraviolet region below 105 nm are well known, as there is a lack of easy-to-handle transfer-standard sources for this spectral region. The line ratio technique has probably been the most widely used method due to its simplicity, it is based on the observation of two spectral lines with a common upper level. The advantage of this method is that the calibration is performed *in situ*, although the principal difficulty is finding, in the spectral region of interest, a sufficient number of suitable line pairs with known accurate transition probabilities.

This technique for calibrations in the v.u.v. has been reviewed by Klose and Wiese¹ and it has been used in the last years by Yang and Cunningham² employing as a light source, electron impact excitation of low-pressure of gases and vapours, Bastert et al³ using a beam-foil source and Sato et al⁴ using a stationary helium plasma into which nitrogen or oxygen gas is introduced.

Recently, new compilations of energy levels and wavelengths of single ionized oxygen,⁵ sulfur,⁶ and aluminum⁷ are known, so the experimental determination of new line ratios is possible. Also, in the last years, elaborated calculations using configuration interaction, have been performed for different ions such as: OII–OIII (Refs. 8–11), NII–NIII (Refs. 11–17), CII–CIII (Refs. 18–22) and Al IV (Refs. 23 and 24). An extensive compilation of recent atomic spectroscopic data can be found in Ref. 25.

In the present work, the relative efficiency of a 3 m normal incidence vacuum ultraviolet monochromator has been determined for the 38.6–133.7 nm spectral range. The monochromator is provided with a multichannel detection system. The line ratio method has been used and a laser

[†]To whom all correspondence should be addressed.

produced plasma has been employed as radiation source. Emission line intensities of line pairs with a common upper level, of ionized oxygen, nitrogen, carbon, sulfur, and aluminum, have been measured. The plasma light source has been produced irradiating different solid targets: ceramic materials (Al_2O_3 , BN), polyethylene, zinc sulfide, and aluminum. Line pairs with both lines in the v.u.v. and low self-absorption have been chosen. Also, measurements have been performed at low laser irradiance to avoid possible small self-absorption effects. No change in line ratio has been observed within the experimental error for changes in laser irradiance in the range 10^9 – $5 \times 10^9 \text{ W/cm}^2$. Also it must be taken into account that, as discussed later on, the relative population of the ionic species changes with the laser irradiance.

The continuum spectrum of a laser-produced tungsten plasma has been obtained and compared with the spectrum given by Fischer et al.²⁶ The relative efficiency obtained in this way, agrees fairly well with the results of the line ratio method.

To identify the transitions the tables of Kelly²⁷ have been used, and the aforementioned of Martin et al.⁵ for OII, and Kaufman and Martin for sulfur⁶ and aluminum.⁷

2. EXPERIMENTAL

2.1. 3m normal incidence monochromator

The normal incidence vacuum ultraviolet monochromator as designed and built, has fixed entrance and exit slits and the wavelength scanning is achieved by a simultaneous rotation and translation of the grating along the bisector of the angle subtended by the slits at the grating center (15° in the present instrument). The grating is rotated about an axis parallel to its grooves and tangent to its center. This rotation provides the wavelength selection. The linear displacement of the grating determines the degree of focusing²⁸ and it is accomplished by a cam mechanism.²⁹ For wavelength scanning the grating is rotated by a sine drive mechanism, which produces a linear wavelength scale as the grating is rotated. Figure 1 shows the linear relation between the monochromator wavelength readout λ_m and the real wavelength λ_r obtained using oxygen lines produced in a hollow cathode light source. A schematic drawing of grating rotation and translation mechanism is shown in Fig. 1. As can be seen, it is different to systems described in Refs. 28, 30 and 31. In the present instrument the cam rotates and leans on a small wheel that is fixed to the bench which performs the translation of the carriage where the grating holder is fixed. Simultaneously a gearwheel rotates moving a sine-bar, that through an arm rigidly attached to the grating achieves the grating rotation.

The reciprocal dispersion at 80 nm in the first order, was 0.139 nm/mm. A precise focusing is obtained beyond the fifth spectral order proving the good performance of the present mounting.

Figure 2 shows a schematic of the v.u.v. spectrometer, which is equipped with a Pt-coated 3 m concave holographic grating of 2400 lines/mm and 100 mm dia, manufactured by Jobin-Yvon. The instrument scans up to 240 nm. The exit slit has been replaced by a multichannel detector. The monochromator is evacuated down to 10^{-6} Torr by a turbomolecular pump.

2.2. Detector system

The detector system consists of a windowless double microchannel plate and phosphor screen image intensifier, (Galileo 3025-FM) with 25 mm dia active area, 12° bias angle and $12 \mu\text{m}$ channels, coupled by fiber optic to a 1024 elements self-scanning linear photodiode array (EG&G Reticon RL1024SAF), each pixel has $25 \mu\text{m}$ width \times 2.5 mm high. The output from the array is digitized by an ADC and stored on a computer, for later analysis. Resolution of the monochromator-detector system is 0.03 nm in first order with $100 \mu\text{m}$ entrance slit width.

Detection is made in synchronism with the electronic trigger of the laser Q-switch. For every period of data acquisition background accumulation and subtraction is made. The optical multichannel detector read-out time was 65 msec for 1024 channels.

2.3. Radiation source

A laser produced plasma has been employed as the radiation source. As aforementioned the plasma was produced irradiating different materials with a 0.35 J, Q-switched Nd:YAG laser at

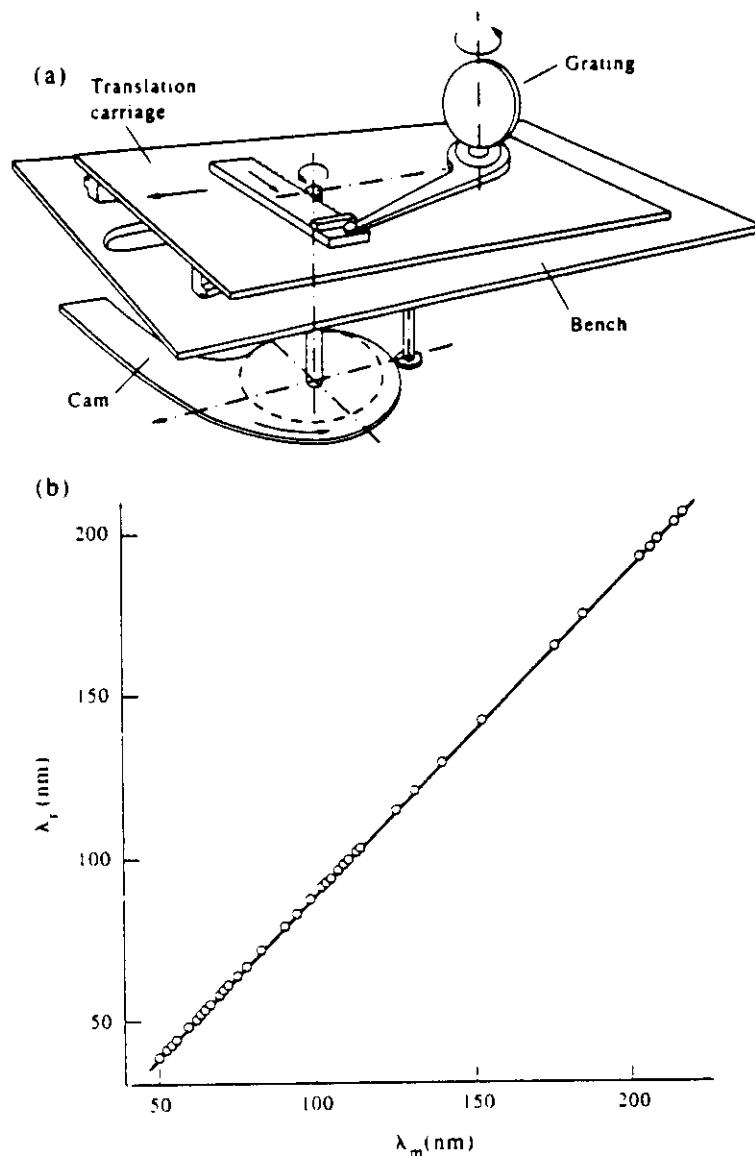


Fig. 1. Lower part: linear relation between the monochromator wavelength readout λ_m and the real wavelength λ_r . Upper part: Schematic drawing showing the grating rotation and translation mechanism.

3 Hz frequency and 1064 nm emission wavelength. The laser beam was focused normally onto the target placed inside a vacuum chamber, the ultimate pressure was below 10^{-5} torr. The target was mounted on a rotating shaft providing fresh material for each laser pulse. The light emitted from the plasma was viewed normal to its main expansion direction at a distance of 14 cm from the entrance slit of the v.u.v. spectrometer. This experimental setup can be seen in Fig. 2. Spectra were recorded at different distances from the target surface and different irradiance values (10^9 – 10^{10} W/cm²). When laser-produced plasma v.u.v. emission is used as a light source, the elements employed must be in a suitable solid matrix.

3. RESULTS AND DISCUSSION

Relative spectral efficiency of the spectrometer–detector system depends on: (a) reflectivity of the platinum coating grating; (b) detection efficiency of the microchannel plates; (c) image size (astigmatism may have great influence on efficiency).

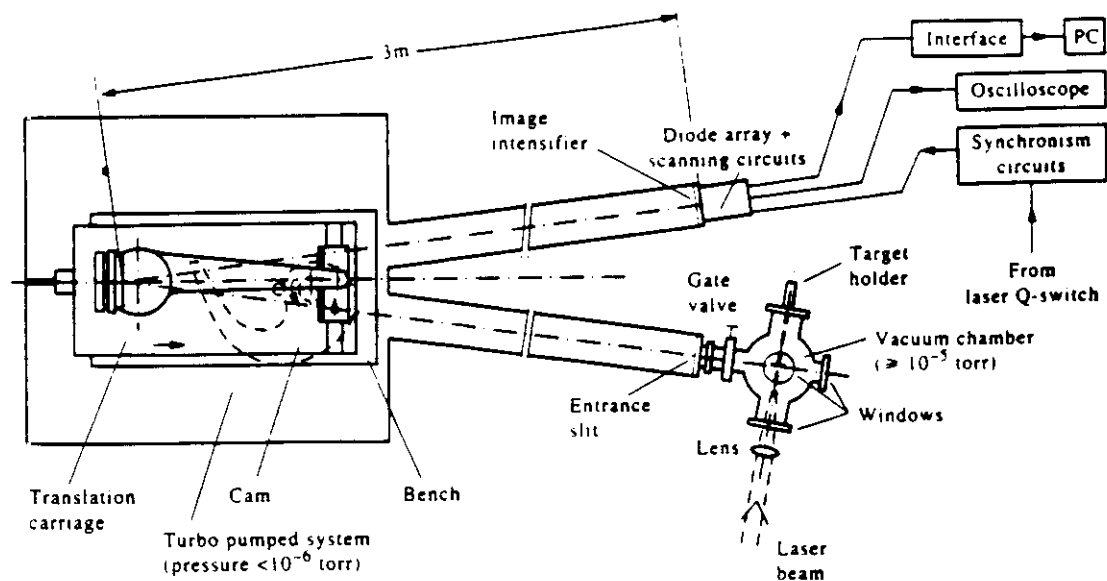


Fig. 2. Experimental set-up: v.u.v. spectrometer and laser-produced plasma source.

Relative spectral efficiency has been determined for the 38.6–133.7 nm spectral range, by using the mentioned line ratio method. The efficiency ratio (ϵ_i/ϵ_j) for two lines with a common upper level is given by:

$$\frac{\epsilon_i}{\epsilon_j} = \frac{I_i A_j}{I_j A_i}$$

measurement of intensities yields the efficiency ratio independently of the population of the upper level.

Table 1 shows line pairs with close wavelengths that have been chosen for calibration and the experimental and theoretical data (obtained from transition probabilities or oscillator strengths calculated using length approximation) from the literature. Next we discuss the line ratios used in this work.

3.1. Ionized oxygen and nitrogen line ratios

The spectral sensitivity of the spectrometric system in the wavelength region from 48.4 to 87.2 nm was determined measuring intensities of ionized-oxygen and ionized-nitrogen lines obtained from a laser-produced plasma of ceramic material, alumina (Al_2O_3) for OII lines and boron nitride (BN) for NII and NIII lines. The measurements were performed at low laser irradiance to avoid blending with lines of higher ions, as the 61.70632 nm OII line, that at high irradiance can undergo interference with the 61.6952, 61.7005, and 61.7036 nm OIV lines. The relative intensity of OII and NIII multiplets was determined by integrating over the multiplet profile.

For line pairs: 48.39/51.81 and 53.81/58.08 nm (OII), 66.03/74.58 and 74.7/85.84 nm (NII), and 69.13/87.20 nm (NIII) we have chosen for calibration the experimental line ratios given in Refs. 3 and 32, which were determined with a spectrometer calibrated by synchrotron radiation using the beam-foil technique. For the OII line ratio 61.65/67.32 nm, it must be taken into account that the 61.65 nm line could be blended by the above mentioned OIV lines, so we used the theoretical line ratio value of Ref. 8 that was obtained using elaborated configuration interaction calculations. With regard to the OIII 52.58/59.78 nm line pair, used for calibration in some papers^{2,4} it is necessary to consider that the 52.5795 nm line could be blended with the 52.59267 nm OII transition [$2s^2 2p^2$ (1S) $3s^2 S \rightarrow 2s^2 2p^3$ (3P)] (Refs. 5 and 41). So this line pair has not been used in this work.

3.2. Ionized carbon, sulfur and aluminum line ratios

The intensity ratio of 38.62 and 88.45 nm lines of CIII obtained from a laser-produced plasma of polyethylene (C_2H_2)_n and the transition probabilities reported by Klose and Wiese¹ have been used to extend the system calibration to 38.6 nm.

Table I. Line pairs used for system calibration, experimental and theoretical line ratio, A. A. from the literature and intensity and efficiency ratios obtained.

Ion	λ_1, λ_2 (nm)	Upper level	Line ratio A. A.				Intensity ratio	Efficiency ratio
			Experiment	Ref.	Theory	Ref.		
CIII	$\frac{38.62}{88.45}$	2s 3p $^1P^o$			9.97+	(1)	3.1 ± 0.3	0.3 ± 0.1
					6.71	(19)		
					8.38	(22)		
					5.30	(35)		
					8.59	(36)		
OII	$\frac{48.39}{51.81}$	2s 2 2p 2 (1P)3d 1P	1.1 ± 0.14	(12)	0.68	(8)	0.87 ± 0.09	0.9 ± 0.2
			$0.95 \pm 0.12^+$	(3)	0.66	(9)		
					0.41	(37)		
					0.81	(38)		
	$\frac{53.81}{58.08}$	2s 2p 4 1P	2.6 ± 0.36	(2)	3.38	(8)	3.1 ± 0.3	0.82 ± 0.19
			$3.8 \pm 0.5^+$	(32)	3.50	(9)		
			4.0 ± 0.6	(33)	3.39	(38)		
	$\frac{61.65}{67.32}$	2s 2 2p 2 (1P)3s 1P	5.3 ± 0.37	(2)	6.15+	(8)	4.53 ± 0.45	0.74 ± 0.22
			7.6 ± 0.8	(29)	5.46	(9)		
					5.56	(37)		
NIII	$\frac{69.13}{87.20}$	2s 2 (1S) 3p $^1P^o$	$2.89 \pm 0.03^+$	(32)	2.84	(17)	2.8 ± 0.5	0.98 ± 0.2
NII	$\frac{66.03}{74.58}$	2s 2p 2 $^1P^o$	3.0 ± 0.3	(2)	2.54	(12)	3.23 ± 0.32	0.98 ± 0.22
			$3.3 \pm 0.4^+$	(32)	2.55	(13)		
			2.57	(34)				
	$\frac{74.70}{85.84}$	2s 2 2p ($^1P^o$)3s $^1P^o$	102 ± 17	(2)	140.3	(12)	164 ± 15	1.14 ± 0.34
			$144 \pm 31^+$	(3)	91.3	(13)		
					148.7	(14)		
SII	$\frac{101.43}{112.47}$	3s 2 3p 2 (1P)4s 1P			82.5	(15)	3.5 ± 0.2	1.29 ± 0.16
					2.98	(39)		
					2.67	(40)		
					2.35	(40)		
Al IV	$\frac{112.56}{133.79}$	2s 2 2p 2 ($^1P^o$)3d $^1P^o$			3.559+	(23)	20 ± 1	5.6 ± 1.4
					3.69	(24)		
	$\frac{119.85}{127.28}$	2s 2 2p 2 ($^1P^o$)3d $^1F^o$			0.20+	(23)	0.33 ± 0.02	1.65 ± 0.41
					0.21	(24)		
	$\frac{122.05}{124.02}$	2s 2 2p 2 ($^1P^o$)3d $^1F^o$			0.395+	(23)	0.42 ± 0.02	1.1 ± 0.3
					0.395	(24)		

+Line ratios used for calibration.

Emission line intensities of SII lines have been measured from a laser produced plasma of zinc sulfide (ZnS). For the 101.4/112.5 nm SII line ratio there is agreement between experimental and theoretical published data. We used for calibration the experimental value of Ref. 2.

To extend the system calibration to 133.7 nm Al IV emission lines and theoretical transition probabilities reported by Hibbert et al.²³ have been used. Measurements have been carried out at low laser irradiance to avoid, in some lines, blending with higher diffraction orders of Al VI and Al VII lines.

3.3. Relative efficiency

Table I shows the efficiency ratios obtained in the present work. The uncertainties of these values were determined from the statistical uncertainties of the intensity ratios and the uncertainties of the transition probability ratios from the literature. Estimated accuracy of theoretical CIII transition probabilities given by Klose and Wiese¹ is 10%, also we have estimated the same

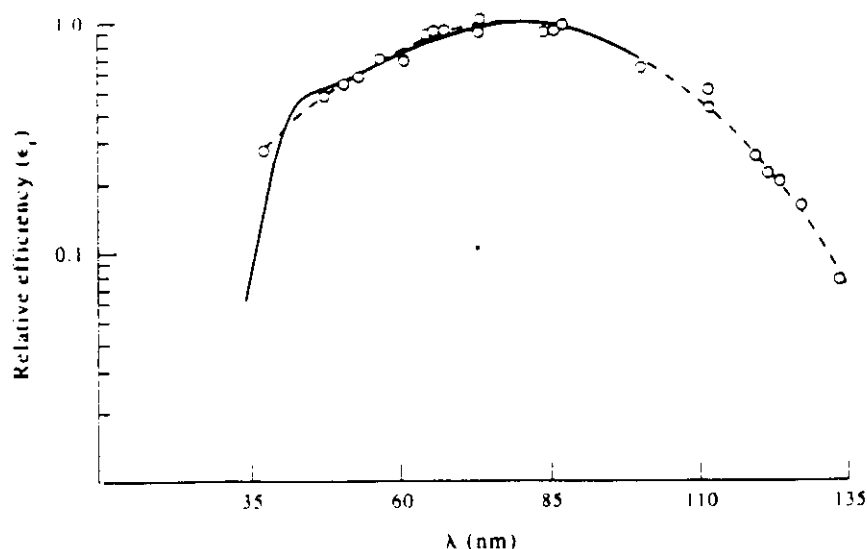


Fig. 3. Relative efficiency ϵ_r of the spectrometer: (----) represents the result obtained by using the line ratio method; (—) the result employing continuum tungsten emission.

accuracy for the rest of the theoretical transition probabilities used for calibration. Relative efficiency (ϵ_r) vs wavelength was obtained fitting the measured efficiency ratios to the function

$$\epsilon_r(\lambda) = \exp(a\lambda^3 + b\lambda^2 + c\lambda + d)$$

where λ is in nm units and a , b , c , d , are fit parameters ($a = -1.477 \cdot 10^{-5} \text{ nm}^{-3}$, $b = -4.334 \cdot 10^{-3} \text{ nm}^{-2}$, $c = 9.769 \cdot 10^{-2} \text{ nm}^{-1}$, $d = -4.285$). The efficiency is normalized to 1 at the maximum. We introduce a cubic polynomial to avoid force symmetry with respect to the maximum efficiency.

The curve of relative efficiency of the system of monochromator plus detector obtained in this way is shown in Fig. 3 (in dashed line) and as will be seen in Sec. 3.4, there is good agreement with the relative efficiency obtained from laser-produced tungsten plasma. The upper wavelength limit of our spectrometric system is essentially due to the rapid decrease of the uncoated microchannel plates' detection efficiency, the lower wavelength limit was mainly determined by the poor reflectivity of the platinum coating of the grating below 35 nm.

3.4. Continuum tungsten emission

Laser-produced tungsten plasmas were investigated as a radiometric transfer standard source for the vacuum ultraviolet and soft-x-ray by Fischer et al.²⁶ We have obtained the continuum spectrum of a laser-produced tungsten plasma for the 35–100 nm spectral range in order to employ these data for the system calibration. Figure 4 shows the obtained spectrum together with the continuum emission of samarium laser-produced plasma. The spectra show similar features for W and Sm in the present spectral range. The continuum tungsten emission measured by our system, corrected by higher-order diffraction, has been compared with the time-integrated spectral concentration of radiant intensity of a laser-produced tungsten plasma given by Fischer et al.²⁶ As pointed out by these authors for laser pulse energies from 100 to 800 mJ, no significant changes of the relative plasma spectral distribution were found. In Fig. 3 can be seen (in continuous line) the relative efficiency obtained in this way and the agreement with the curve obtained using the branching ratio method.

4. CONCLUSIONS

Laser produced plasma as light source and the line ratio method have been used to calibrate a v.u.v. spectrometer. Appropriate v.u.v. line pairs are selected from recent data of transition probabilities or line ratios. The sensitivity curve agrees fairly well with that measured by using a tungsten laser produced plasma. The accuracy of transition probabilities or line ratios limits the precision of the method, however the knowledge of new and more accurate experimental and theoretical data will improve the precision of the line ratio method.

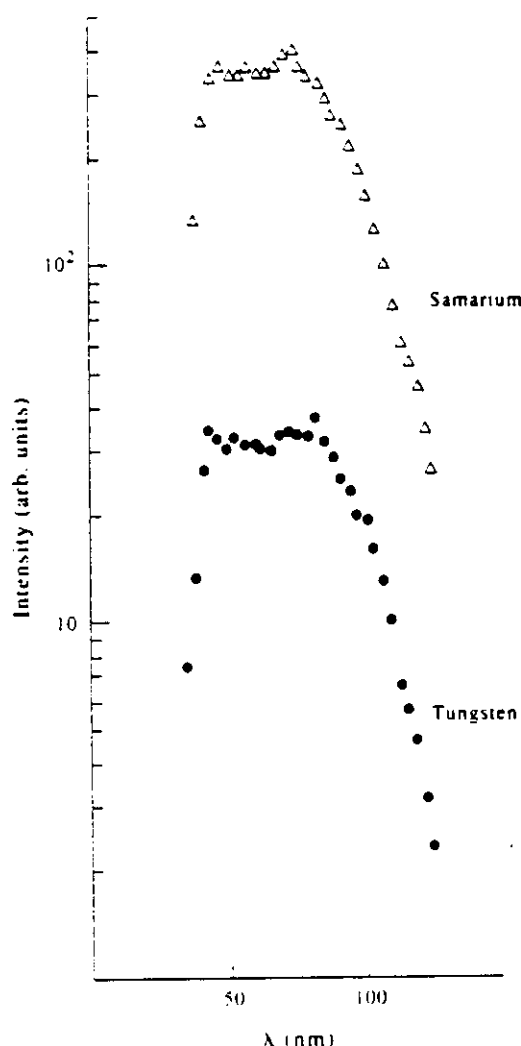


Fig. 4. Continuum spectra obtained from laser-produced plasma using tungsten and samarium targets.

Acknowledgements—This work was performed with partial financial support of the Spanish DGICYT (project PB 95-0369-CO2).

REFERENCES

1. J. Z. Klose and W. L. Wiese, *JQSRT* **42**, 337 (1989).
2. F. Yang and A. J. Cunningham, *JQSRT* **49**, 53 (1993).
3. A. Bastert, H. H. Bukow, and H. von Buttlar, *Appl. Opt.* **31**, 6597 (1992).
4. K. Sato, M. Otsuka, and M. Mimura, *Appl. Opt.* **23**, 3336 (1984).
5. W. C. Martin, V. Kaufman, and A. Musgrove, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **22**, 1179 (1993).
6. V. Kaufman and W. C. Martin, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **22**, 279 (1993).
7. V. Kaufman and W. C. Martin, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **20**, 775 (1991).
8. K. L. Bell, A. Hibbert, R. P. Stafford, and B. M. McLaughlin, *Phys. Scripta* **50**, 343 (1994).
9. K. L. Bell, A. Hibbert, B. M. McLaughlin, and K. Higgins, *J. Phys. B* **24**, 2665 (1991).
10. Ch. Froese Fischer, *Phys. Scripta* **49**, 51 (1994).
11. B. C. Fawcett, *At. Data and Nucl. Data Tables* **37**, 411 (1987).
12. K. L. Bell, A. Hibbert, and R. P. Stafford, *Phys. Scripta* **52**, 240 (1995).
13. D. G. Ellis, *Phys. Rev. A* **47**, 161 (1993).
14. K. L. Bell, C. A. Ramsbottom, and A. Hibbert, *J. Phys. B* **25**, 1735 (1992).
15. D. Luo and A. K. Pradhan, *J. Phys. B* **22**, 3377 (1989).
16. G. A. Victor and V. Escalante, *At. Data and Nucl. Data Tables* **40**, 227 (1988).
17. R. P. Stafford, A. Hibbert, and K. L. Bell, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **260**, L11 (1993).
18. Ch. Froese Fisher, *Phys. Scripta* **49**, 323 (1994).
19. N. Allard, M. C. Artru, T. Lanz, and M. Le Dourneuf, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **84**, 563 (1990).
20. N. Allard, M. C. Artru, T. Lanz, and M. Le Dourneuf, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **91**, 399 (1991).
21. J. A. Tully, M. J. Seaton, and K. A. Berrington, *J. Phys. B* **23**, 3811 (1990).

22. B. C. Fawcett, *At. Data and Nucl. Data Tables* **30**, 423 (1984).
23. A. Hibbert, M. Le Dourneuf, and M. Mohan, *At. Data and Nucl. Data Tables* **53**, 23 (1993).
24. B. C. Fawcett, *Phys. Scripta* **30**, 326 (1984).
25. W. L. Wiese (Ed.), *J. Bergeron, Reports on Astronomy XXIIA*, 105 (1994).
26. J. Fischer, M. Kühne, and B. Wende, *Metrologia* **23**, 179 (1986/1987).
27. R. L. Kelly, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **16**, Suppl. 1 (1987).
28. J. A. R. Samson, *Techniques of Vacuum Ultraviolet Spectroscopy*, Wiley, New York, NY (1967).
29. P. Martin, C. Peraza, F. Blanco, and J. Campos, "3m Vacuum Ultraviolet Spectrometer with Optical Multichannel Detector", Technical Report CIEMAT 716, 8 (1993).
30. B. R. Lewis, *Appl. Opt.* **21**, 2523 (1982).
31. H. W. Moos, K. I. Chen, J. L. Terry, and W. G. Fastie, *Appl. Opt.* **18**, 1209 (1979).
32. R. Hibst and H. H. Bukow, *Nucl. Instr. and Meth. B* **31**, 284 (1988).
33. H. J. Flaig, K. H. Scharfner, E. Träbert, and P. H. Heckmann, *Phys. Scripta* **31**, 255 (1985).
34. L. J. Ryan, L. A. Rayburn, and A. J. Cunningham, *JQSRT* **42**, 295 (1989).
35. A. K. Bhatia and S. O. Kastner, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **79**, 139 (1992).
36. R. M. Nasser and Y. P. Varshni, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **60**, 325 (1985).
37. S. R. Becker and Butler, *Astron. Astrophys.* **201**, 232 (1988).
38. Y. K. Ho and R. J. W. Henry, *JQSRT* **31**, 57 (1984).
39. P. C. Ojha and A. Hibbert, *J. Phys. B* **22**, 1153 (1989).
40. Y. K. Ho and R. J. W. Henry, *Phys. Scripta* **35**, 831 (1987).
41. K. B. S. Eriksson, *JOSA B* **4**, 1369 (1987).